ファインマン経路積分

L.S.シュルマン／著
高塚　和夫／訳

講談社サイエンティフィク

Library of Congress Cataloging in Publication Data:

Schulman, Lawrence S
Techniques and applications of path integration.

"A Wiley-Interscience publication."
Bibliography: p.
Includes indexes.
1. Integrals, Path. I. Title.

QC174.17.P27S38 530.1′2 80-19129
ISBN 0-471-76450-7

Printed in the United States of America

10 9 8

To the memory of my father
Louis Schulman

序　　文

本書は，十何年か前，私が初めてイスラエルに滞在した際，テクニオンで行なった物理学の講義が元になっている．当時は今と違って，経路積分は物理学のどのような分野の主流にもなっておらず，経路積分を研究している人であっても，実際の目的というよりは美学的なセンスに衝き動かされてやっていたように思う．いずれにせよ，1950年代に大成功をおさめた初期のアイデアが，当時も推し進められていた．私が経路積分に興味をもったのは，ほんの偶然のこと——Schwinger編の量子電磁力学の論文選集を読んでいたとき．ページがぱらぱらっとすべって，*Reviews of Modern Physics*誌に発表されたFeynmanの例の論文のところで止まった．これだ！私は，学位論文のテーマに，スピンについての経路積分を試みることに決めたのだった．

1970年代は，経路積分には長い10年だった．統計力学にとって，経路積分は，くりこみ群を使った変換を初めて定式化した際の基本的枠組みだった．これは不純物を含む固体の物理に広く使われた．素粒子物理学の「インスタントン工場」に働く理論屋たちにとっては，経路積分は基本的な手法になっており，ゲージ場理論に応用された（方法論のうちのあるものは，別の問題で1960年代に発展していたが）．化学，原子および原子核物理学では，散乱理論に半古典近似が応用された．場の量子論と統計力学の厳密な研究には，汎関数積分の方法がくり返し使われた．

本書の目的は，方法論と応用を伝えることである．経路積分のなんたるかを述べ，その後，実例を通して，どんなふうに使われてきたか，また，使いうるかを示したい．この本は，数学の細部にこだわらない（こだわれない？）物理屋の行き方で通す．レベルとしては，量子力学の基礎のコースに困難を覚えない程度を想定している．特別な知識が前提となることもあるが，経路積分に関係のない背景については，そのつど説明を与えておいた．

経路積分の意味を通して量子力学を一般的に理解することについては，ファインマンの*Reviews of Modern Physics* 誌の原論文と，彼がHibbsと著した本に美しく説明されている．したがって，これについては本書では軽く触れる程度である．Feynman-Hibbsの教科書は，応用も多く含んでおり，そのうちのあるものは本書でも手短かに扱っている．また，Feynmanの著書は，彼自身が発展させた応用に力点が置かれ，それによってかなりの知識が得られるものの，まだ，たっぷりとやる事が本書に残されている．

本書の第1部では，経路積分を扱う手法を展開する．ここでは，基本的には，通常の量子力学から，数学的に正しい帰結としての（つまりトロッター公式を使って）経路積分を導く．もちろん，厳密性には欠けるものの，すべての経路に沿って$\exp(iS/\hbar)$の和をとる，という話もする．実際，この本でも経路の和という見方をいたるところで採用する．しかし，いちいち数学的厳密さを追及することはしないが，一方で，経路積分を勉強していて落ちこみそうな誤りは，除くように努めたつもりである．特に，次の関係式（Δ距離)^2 ～（Δ時間）についてはかなり議論する．この関係は，事象の履歴についてファインマン和をとる際に使われる経路の中心的な性質である．通常の量子論の枠組みは，経路積分からも再現されるが，本書の目的としては，それを強調することはしない．経路積分の厳密解――調和振動子とその変形――をあらわな形に書きおろしてみて，経路和というようなおそろしい仕事も，場合によっては本当に実行可能だということを示す．最初のほうで，ウイーナーの経路積分も紹介しておこう．これは，形の上では，ファインマンのそれより早生まれの従兄弟でありながら，経路積分の手続きに関して，数学的厳密性に問題がない．ここでは，ウイーナーの経路積分によって与えられる，確率とポテンシャル理論の間の深い関係を示しつつ，めったにはできない厳密な証明を楽しんだり，到達時間の計算をお見せしたりする．

この本に出てくる応用例の選択について，特にお断りしておかなければならない．扱ったトピックスについて，私には，最初にそれを知り，つぎに理解し（したと思う），その後，おもしろさ，わくわくすること，基礎的なこと，あるいは，なにかしらそれに近いものを含んでいるのを見つけ，そして最後に，それを表現する時間が必要だった．上の3番目の基準を満たしても

他の部分を満たさないという研究が，実際確かにあるものである．そのようなわけで，入れることができなかった話題を30章に手短かに扱ったが，この章はまた，美しい応用がたくさん出てこないとしても，いつかは終えなければならなかった本書の宿命の反映ともいえる．

一方，扱った応用について・・・半古典近似には多くのスペースをさいた．汎関数積分に対する停留位相近似の数学的正当性は，完璧とはいかないが，少なくとも，読者の応用上の興味からいって重要である．また，Feynmanの量子力学の定式化に私が感銘を受けた特徴の1つは，（停留位相近似を通して）古典力学極限への対応($\hbar\to 0$) の自然さということだった．もちろん，その数学的側面は未だ完璧とはいかないが，それによってアイデアの美しさが減ずることはない．告白すると，私は，読者の興味をつなぎとめるためというよりは，19世紀と20世紀に生まれた多くの異なった数学の糸が，よりあわされていくその在り方のほうに半古典近似の魅力を感じるのだ．11章から18章は，それに関連してつぎのトピックスをとりあげる：(1) 古典力学の変分問題と軌道の（単に停留値ではなく）最小値性――ヤコビ方程式，(2) モース指数の理論，(3) 漸近解析とその次数の関係等，(4) ステュルム - リウヴィル理論，(5) Thomのカタストロフィー理論，(6) ユニフォーム漸近解析．

半古典論の結果から出発すれば，散乱理論（19章）と光学の経路積分(20章）の近似理論を導くのはむずかしくない．光学のほうには，不自然な定義が必要となるが，一時的にはエレガントに見えなくとも，つぎのことで充分償われると思う．それは，半古典経路積分が，幾何光学（そして物理学的光学にさえ）に直結し，Kellerの「幾何学的回折」の理論までも得られる可能性が出てくるからである．（この本では，この可能性について示唆するだけで，最後までは行かないが．）

多分，経路積分の初期の応用で一番有名なものはポーラロンである．ポーラロンが経路積分を売りこむ上でなぜ特別かというと，解を見つけるのに役立つだけでなく，答えが別の方法からわかっていたとしても，それを計算する最良の方法でありつづけているからである．私は，ポーラロンが，扱いやすい場の理論の実例になっているという意味で，気に入っている．つまり，経路積分を使って得られる利益は，量子電磁力学で得られるものと全体には

類似しているが，後者の場合は，発散，場のベクトル性，およびゲージ問題のせいで，あらゆる段階でよりむずかしくなっている．Q. E. D. は，30章で簡単に触れる．

スピンのための経路積分には，3つの章を充てる．私自身が開発した方法を強調してもお許しいただけると思う．正直なところ，もし磁場中の水素原子の問題を解かなければならないとしたら，私は自分の理論を使おうとは思わない．にもかかわらず，私の方法を勉強すれば，経路積分でどうやったらスピンが扱えるかがわかる．しかも，スピンの経路積分を発展させる際に出てくるホモトピー理論のある部分は，ゲージ理論にも重要だ，ということがわかってきている．残念ながら，ゲージ理論の経路積分的とり扱いはこの本ではほとんど言及できない──これには，特に後悔が残る．

相対論的プロパゲータ（発展演算子）の章は本書の中心でもあり，なおかつ，ついでに採りあげた話題ともいえる．読者が，量子力学の基礎としての経路積分を考えたいのなら，相対論的フォーマリズムを考えたほうがよい．自然がそうなっているのだから．一方，25章の一番の見せ場は，ブラックホール近傍での強い重力場に置かれている粒子を扱う所である．この応用を見れば，経路積分がいかに多才か，はっきりわかる．この章には，一般相対論の背景となる知識が，いくらか必要である．

経路積分の統計力学への応用は，本来ならそれだけで，ゆうに本1冊分になってしまう．統計物理の基本量である分配関数は，汎関数積分で記述するのがいちばん便利である．26章から30章にかけて，一般論とある種の応用を示す．不純物を含む系を調べることにする．今いちばん発展している研究を示すのが最終目的というわけではないので，参考文献を挙げておいたから，足りない部分はそれで補っていただきたい．1970年代のインスタントンやその類似概念は，一次相転移の準安定性を経路積分によって研究している最中に，いわば臨界状態の中から生まれた．われわれは，中立な物理的視点に立って，解析接続を実行する方法を示す．

コヒーレント状態に関する章は，偶然だけれども，本書では統計力学の部分に入っている．コヒーレント状態経路積分は，1つは，ボソン場の統計力学に応用されている．本来なら，強い関連がある位相空間経路積分も，同じ

程度に扱うこともできたのだろうが，積極的にはしなかった．読者にはすぐ，私が数学の細部にひどくこだわるほうではない，ということがわかっていただけると思うが，位相空間経路積分というのは，未知の領域というよりは，困った問題の多い領域だと考えている．そのようなわけで，これは本書からはずすべきだったかとさえ思う．しかし，位相空間経路積分を使っている研究者と話してみると，一体何が問題なのか，彼らが知りたがっていることがしばしばあった．29章で，それに答えようと思う．

各章にはそれぞれ参考文献やノートをつけておいた．派生する問題やその背景を示すには，これがいちばんだと思う．これら参考文献は，著者名索引からも検索できるようにしておいた．

この本には，まだ発表していない研究も含まれている．特に，半古典近似の章がそうである．コースティクの話題は，1973年のある研究会で報告したものの，論文に仕上げないまま本書にいたっている．

本書が完成をみたのは多くの学生や同僚のおかげである．なかでも，Seteve Coyne，Gianfausto Dell'Antonio，Mark Kac，Don Lichtenberg，Ady Mann，Rebecca McCraw，David Mclaughlin，Charles Newman，Michael Revzen，Roman Shtokhamer，Barry Simon，David Wallace，Arthur Wightman，Joshua Zak，の各氏の名前を挙げて謝意を表したい．タイプについても，うまい人にたくさんお世話いただいたが，Judy Huffaker Hommond とGila Ezion には特にお礼を申し上げたい．

イスラエル　ハイファにて

1981年1月

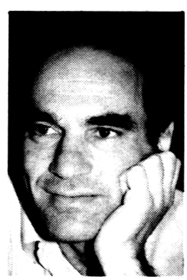
L. S. Schulman

Preface for Japanese translation of my path integral book:
(日本語版への序文)

More than 50 years after its birth, the path integral continues to exhibit the vigor and features of youth. Mathematicians would agree that they have yet to apprehend its final form. Moreover, they ate prepared for occasional misbehavior. For physicists there is an intertwined development in which new physical phenomena benefit from its use and new uses elicit extensions of the technique itself. My own attraction to the subject began with its beauty, with its hint of philosophy, and mostly perhaps with the idea that through this approach lay an understanding or even discovery of physical law.

It is a great pleasure to welcome the present work of Prof. Takatsuka. Perhaps someday I will be able to comment on the quality of the translation! From our correspondence though I have the impression that he is the sort of person who could transmit the enthusiasm for the field that is best conveyed in one's native language. I hope then that Japanese readers will be able to share in the pleasures and uses of this subject.





目　次

第1部　入　門　編

1章　経路積分，その導入と定義

経路積分との出会いの場所といえば，やはりFeynmanの原論文がもっともふさわしい（参考文献は，各章末に掲げた）.

Feynmanは，Hibbsとの共著の教科書で，経路積分から出発して量子力学へいたるという立場をとっているが，本書の方針はそうではない．むしろ，量子力学の知識を前提として，経路積分の理論形式を導く．このほうが，本質にすばやく到達することができる．

スピンをもたない非相対論的粒子の波動関数は，シュレーディンガー方程式

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1-1}$$

$$H = T + V = \frac{1}{2m}p^2 + V = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \tag{1-2}$$

にしたがって時間発展する．

そこで，われわれが調べたいものは，プロパゲータまたはグリーン関数Gである．それは，演算子の記法で

$$\left(H - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)G(t, t_0) = -i\hbar\mathbf{1}\delta(t-t_0) \tag{1-3}$$

を満たす．座標空間では，

$$\left(H_x - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)G(x, t; y, t_0) = -i\hbar\delta(x-y)\delta(t-t_0) \tag{1-4}$$

と書かれる．2つのGは，

$$G(x, t; y, t_0) = \langle x|G(t, t_0)|y\rangle \tag{1-5}$$

で結ばれている．Gがわかったということは，時間依存のシュレーディンガー方程式の解がわかったということと同値で，その意味は，時刻t_0で系の状態が$\varphi(t_0)$で与えられているとき，t_0での状態$\varphi(t)$が

$$\psi(t) = G(t, t_0)\psi(t_0) \tag{1-6}$$

となるということである．時間に依存しないHについては，(1-3)式の解はただちに

書き下せて

$$G(t,t_0)=\theta(t-t_0)\exp\left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{1-7}$$

となる．ただし，θは，階段（ステップ）関数である．Hが時間に依存しなければ，一般性を失うことなく，$t_0=0$ととることができる．すると，$t>0$では，

$$G(x,t;y)=\langle x|e^{-iHt/\hbar}|y\rangle \tag{1-8}$$

としておけばよい．

経路積分は，簡単な事実

$$e^A=(e^{A/N})^N \tag{1-9}$$

から導くことができる．$\lambda=it/\hbar$と置くと，

$$G(x,t;y)=\langle x|e^{-\lambda(T+V)/N}e^{-\lambda(T+V)/N}\cdots e^{-\lambda(T+V)/N}|y\rangle \tag{1-10}$$

と書くことができるが，ここにはN項の積が含まれている．ここで，2つの演算子を含む指数関数についての，基本的な関係式

$$e^{-\lambda(T+V)/N}=e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}+\mathrm{O}\left(\frac{\lambda^2}{N^2}\right) \tag{1-11}$$

を利用する．これは，簡単に証明できる[脚注(1)]．

(1-11)式の級数展開で，λ^2/N^2の係数は

$$A=\tfrac{1}{2}[V,T]$$

になっている．以下のとりあつかいでは，$O(1/N^2)$の項は，おとなしいふるまいをするものと仮定する．すなわち，波動関数に掛けるなどしたとき，有界であるとする．物理的に合理的なポテンシャルでは，この仮定は正しい．この点については，付録の部分で，もう少し言及する．

われわれがしたいのは，

$$\left[e^{-\lambda(T+V)/N}\right]^N=\left[e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}+\mathrm{O}(1/N^2)\right]^N \tag{1-12}$$

を

$$\left[e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}\right]^N \tag{1-13}$$

で置きかえることである．演算子ではなくて，普通の実数ならば，指数関数の性質か

脚注(1)　この展開を証明するには，$\exp(\lambda T/N)\exp(-\lambda(T+V)/N)\exp(\lambda V/N)$の微分を見てやるとよい．

ら，この置きかえは問題ない．展開

$$\left(1+\frac{x+y_n}{n}\right)^n$$

は，y_nが存在しても，$n\to\infty$ で$y_n\to 0$であるならば，e^xに収束する（この証明は，$|y_n|<\delta$を満たす十分大きなnをとることによって

$$\left(1+\frac{x-\delta}{n}\right)^n<\left(1+\frac{x+y_n}{n}\right)^n<\left(1+\frac{x+\delta}{n}\right)^n$$

のように上限と下限をつくり，さらに，nが$|(x-8)/n|<1$を満たすほど大きいことを仮定すればできる）．

演算子を操作する場合には，注意が必要である．数学的なトリックは，(1-12)式と(1-13)式の差を，特殊な形で，つまり

$$\begin{aligned}(e^{-\lambda T/N}&e^{-\lambda V/N})^N-(e^{-\lambda(T+V)/N})^N\\ &=\left[e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}-e^{-\lambda(T+V)/N}\right](e^{-\lambda(T+V)/N})^{N-1}\\ &\quad+e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}\left[e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}-e^{-\lambda(T+V)/N}\right]e^{-\lambda(T+V)(N-2)/N}\\ &\quad+\cdots+(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^{N-1}\left[e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}-e^{-\lambda(T+V)/N}\right]\end{aligned}\tag{1-14}$$

のように表現することである．(1-14)式は，恒等式．ここには，N個の項があり，それぞれに，$\exp(-\lambda T/N)\exp(-\lambda V/N)-\exp(-\lambda(T+V)/N)$の因子が含まれているが，これは(1-11)式によって，$1/N^2$のオーダーなのである．よって，極限ではゼロにいく（付録に，詳細を示す）．

こうして，(1-10)式が

$$G(x,t;y)=\lim_{N\to\infty}\langle x|(e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N})^N|y\rangle \tag{1-15}$$

で置きかえられることを見た．これは，実際上，トロッター(Trotter)の積公式を発見法的に証明したことにほかならない．ここまでくれば，経路積分は，ほんの数ステップで到達できる．掛けても1になるだけの恒等（単位）演算子

$$\int dx_j|x_j\rangle\langle x_j|,\qquad j=1,\ldots,N-1 \tag{1-16}$$

を，(1-15)式の積の各項の間に挟むと，

$$G(x,t;y)=\lim_{N\to\infty}\int dx_1\cdots dx_{N-1}\prod_{j=0}^{N-1}\langle x_{j+1}|e^{-\lambda T/N}e^{-\lambda V/N}|x_j\rangle \tag{1-17}$$

となる（便宜上，$y=x_0$, $x=x_N$とした）．ポテンシャルVは，座標（配位）空間では，対角であるから

$$\exp\left(-\frac{\lambda V}{N}\right)|x_j\rangle = |x_j\rangle \exp\left(-\frac{\lambda V(x_j)}{N}\right) \tag{1-18}$$

がなりたつ．つぎに必要なのは，座標空間上での$\exp(-\lambda T/N)$の（$\langle\eta|$と$|\xi\rangle$の間の）行列要素だが，今度は，運動量状態の完全系

$$\mathbf{1} = \int dp|p\rangle\langle p| \qquad \text{ただし} \qquad \langle p|\xi\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp\left(-\frac{ip\xi}{\hbar}\right) \tag{1-19}$$

を使う．すると，

$$\begin{aligned}\langle\eta|e^{-\lambda T/N}|\xi\rangle &= \int dp\langle\eta|e^{-\lambda T/N}|p\rangle\langle p|\xi\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\lambda p^2/2mN} e^{ip(\eta-\xi)/\hbar}\end{aligned} \tag{1-20}$$

になる．ここで初めてガウス積分が現われたが，ガウス積分は，本書では一貫して最後まで出てくる．公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by}dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\; e^{b^2/4a} \tag{1-21}$$

を使って，

$$\langle\eta|e^{-\lambda T/N}|\xi\rangle = \sqrt{\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2}}\; e^{-mN(\eta-\xi)^2/2\lambda\hbar^2} \tag{1-22}$$

が得られる．(1-18)式と(1-22)式を(1-17)式に代入すると，

$$\begin{aligned}G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty}\int dx_1\cdots dx_{N-1}\left(\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2}\right)^{N/2} \\ \times\prod_{j=0}^{N-1}\exp\left[-\frac{m(x_{j+1}-x_j)^2N}{2\lambda\hbar^2}-\frac{\lambda V(x_j)}{N}\right]\end{aligned} \tag{1-23}$$

となる．ここで，$e=t/N=\hbar\lambda/iN$とし，さらに(1-23)式の指数関数を1つにまとめると，

$$\begin{aligned}G(x,t;y) = \lim_{N\to\infty}\int dx_1\cdots dx_{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{N/2} \\ \times\exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2-V(x_j)\right]\right]\end{aligned} \tag{1-24}$$

のように変形できる．これは，プロパゲータの経路積分表現である．この式がどうして「経路積分」とか「履歴の和」とよばれるのか，説明の必要があるだろう．

点$y, x_1, \ldots, x_{N-1}, x$が，線分で結ばれているとしよう．このとき，$y$から$x$への，折れ線の道があるわけだ．(1-24)式の指数関数の中の和は，ある経路に沿って計算されるリーマン和，すなわち

$$\sum_{j=0}^{N-1} \varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right] \sim \int_0^t d\tau\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x)\right] \qquad (1\text{-}25)$$

と解釈できる．右辺の被積分関数は，古典力学でよく知られたラグランジアン

$$L=\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \qquad (1\text{-}26)$$

である．これに対応して（量子化されているが），ハミルトニアン(1-2)式が存在する．(1-24)式の指数関数の肩は，したがって，$iS/\hbar$ である．ただし，作用積分 S は，$y, x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x$ を結ぶ折れ線経路に沿って計算する．純粋に古典力学では，古典ラグランジアンを使って

$$S=\int L\,dt \qquad (1\text{-}27)$$

変数 $x_1, \dots, x_{N-1}$ についての積分は，y と x を結ぶすべての可能な折れ線経路について和をとることと解釈される．どんな連続な経路も折れ線経路で近似できるから，N の極限をとるという事実を考えれば，積分をすべての経路についての和で置きかえてよいと，楽観的に解釈したくなる．(1-24)式の最後の飾りつけには，「規格化定数」とよばれる

$$C=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{N/2} \qquad (1\text{-}28)$$

を使う．これは，$N\to\infty$ の極限で発散するが，G がユニタリー演算子であることを保証する役割をもつ（これについては，後述）．以上で，(1-24)式は

$$G(x,t;y)=C\sum_{\substack{x(\cdot)\\ x(0)=y\\ x(t)=x}} e^{iS[x(\cdot)]/\hbar} \qquad (1\text{-}29)$$

の形に書けた．これこそ，$x(0)=y$ と $x(t)=x$ を満たす経路，または，履歴の上での $e^{is[x(\cdot)]/\hbar}$ の和ではないか．ここで，大文字の Σ は，きちんとした測度をわれわれがもっている，という印象を避けるために使った．また，経路積分理論の現状では，(1-29)式のような式に出くわしても，それが(1-24)式以上でも以下でもない，ということを知っておかなければならない（ほかの書物の著者には，もっとそれらしい記号を使う人もいる）．

演習：　時間依存のハミルトニアン

$$H=\frac{p^2}{2m(t)}+V(x,t)$$

の場合のグリーン関数の経路積分表現を導け．

ヒント　(1)　(1-7)式は，ここでは正しくないが，

$$G(t_1, t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \exp\left(\frac{\Delta t\, H(t_1)}{i\hbar}\right) \exp\left(\frac{\Delta t\, H(t_1 - \Delta t)}{i\hbar}\right) \times \cdots$$

$$\times \exp\left(\frac{\Delta t\, H(t_0 + 2\Delta t)}{i\hbar}\right) \exp\left(\frac{\Delta t\, H(t_0 + \Delta t)}{i\hbar}\right) \qquad (1\text{-}30)$$

は，まだなりたつ．ただし，これは $(t_1 - t_0)/\Delta t$ 個の項の積からなる．(1-30)式は，時間順序積であるが，これについては，あとで触れる．

(2)　時間の変数を変更するとよい．

付録：　トロッター(Trotter)積公式

定理（トロッター積公式）　A と B をバナッハ(Banach)空間 X の線形作用素（本章に限り，演算子を数学者が好んで使う「作用素」ということにする）とし，A，B および $A+B$ が，それぞれ，縮小半群 P^t，Q^t，および R^t の無限小生成作用素になっているものとする．そのとき，すべての $\psi \in X$ に対して，

$$R^t \psi = \lim_{n \to \infty} \left(P^{t/n} Q^{t/n}\right)^n \psi$$

が成立する．

この付録では，上で使われている記号の定義を行ない，定理の証明の概要と，その帰結を調べることにする．

半群は，2項間の結合演算が，その中で閉じている要素の集合である．逆元があれば，それは群を構成する．半群は，単位元をもってももたなくてもよい．

定義：　バナッハ空間 X 上の縮小半群とは，いたるところ有界な線形作用素 P^t の族である．ただし，$0 \leqslant t < \infty$．P^t は，写像 $X \to X$ を引き起こし，

$$P^0 = 1; \qquad P^t P^s = P^{t+s} \qquad 0 < t, s < \infty$$

$$\| P^t \| \leqslant 1 \qquad 0 < t < \infty$$

$$\lim_{t \to 0} P^t \psi = \psi \qquad \psi \in X$$

を性質としてもつ．ここで使ったノルムは，

$$\|Q\| = \inf_{\beta \in B} \beta \qquad \text{ここで}\ B = \{\beta \,|\, \|Qx\| \leqslant \beta \|x\| \text{ for all } x \in X\}$$

で定義し，$\|x\|$ は X 上でのノルムである．縮小という言葉は，$\|P^t\| \leqslant 1$ からきている．ベクトルは，P^t によって時間発展しても，大きくなっていくことはない．P^t の無限小生成作用素 A は，

$$A\psi = \lim_{t \to 0} \frac{1}{t}(P^t\psi - \psi)$$

で定義される．この極限が存在するすべての関数 $\psi \in X$ が，作用素の定義域 $D(A)$ をなす．

定理の証明に対する注意：（ただし，作用素の適用領域については，ほとんどなにもいわないことにする）．h を正の実数，P, Q, R を定理に使われている記号そのものとする．生成作用素の定義によって，

$$(P^hQ^h - 1)\psi = (P^h - 1)\psi + P^h(Q^h - 1)\psi = h(A + B)\psi + o(h)$$

がなりたつ．ここで，$o(h)$ は $\lim_{h \to 0} \|x\|/h = 0$ となるようなベクトル x を意味する．すると，

$$(R^h - 1)\psi = h(A + B)\psi + o(h)$$

だから，

$$(P^hQ^h - R^h)\psi = o(h).$$

がなりたつ．ここで，$o(h)$ の有界性の一様さを確立しておかねばならない．無限小生成作用がもたなければならない性質を使って，$D(A+B)$ のコンパクトな部分集合に属する ψ に対して，$h^{-1}\|(P^hQ^h - R^h)\psi\|$ が一様有界であることを示す．ある $\psi \in D(A+B)$ に対して，$0 \leqslant s \leqslant t$ の $\{R^s\psi\}$ は，コンパクトで，かつ，$D(A+B)$ に含まれる．したがって，s を動かしても，一様に $\|(P^hQ^h - R^h)R^s\psi\| = o(h)$ がなりたつ．

$h = t/n$ とせよ．このとき，

$$\|\left((P^hQ^h)^n - R^{hn}\right)\psi\| \to 0 \quad (n \to \infty \text{ に対して})$$

を示したい．そのために，

$$\begin{aligned}(P^hQ^h)^n - R^{hn} = (P^hQ^h - R^h)R^{h(n-1)} + P^hQ^h(P^hQ^h - R^h)R^{h(n-2)} + \cdots \\ + (P^hQ^h)^{n-1}(P^hQ^h - R^h)\end{aligned}$$

を調べる．ついで，これを，ψ に施し（掛け），$\|P^hQ^h\| \leqslant 1$ という事実を使う．これ

から，

$$\|((P^hQ^h)^n-R^{nh})\psi\|\leq\|(P^hQ^h-R^h)R^{h(n-1)}\psi\|+\cdots=no\left(\frac{t}{n}\right)\to 0,$$

がでる．ここで，極限は一様に収束する．

この公式を物理に応用するには，

$$A=i\Delta,\quad B=-iV$$
$$-(A+B)=i(-\Delta+V)=iH$$

とすればよい．こうして，A，B，および$A+B$が縮小半群をつくるかどうか知る必要がある．基本的には，$\|e^C\|$ を調べることが本質である．ここでCは，これらの無限小生成作用素である．いま，

$$\|Q\|=\sup_{\psi\in X}\frac{\|Q\psi\|}{\|\psi\|}$$

であった．Vの場合には，なんの問題もない．それは，Vがただの掛け算を引き起こすだけだから，

$$\|e^{-iV}\psi\|^2=\int dx\,e^{iV(x)}\psi^*(x)e^{-iV(x)}\psi(x)=\int dx|\psi(x)|^2=\|\psi\|^2$$

は，すべてのtに対して，$\|e^{-iVt}\|=1$ を意味するからである．

ラプラシアンΔが縮小半群を生成することを示すために，ノルムについての初等的な事実とその直感的意味を復習しておこう．一般的にいって，ノルムというのは，その最大固有値に関係している．もし，Xが有限(M)次元だとすると，$Q\psi_i=q_i\psi_i$，$i=1, \ldots, M$が存在する．最悪の場合というのは，最大値の$|q_i|$（それを$|\tilde{q}|$とし，その固有関数を$\tilde{\psi}$としよう）のときに起きる．というのは，そのときには，$\|Q\|=\max_\psi\|Q\psi\|/\|\psi\|=\|Q\tilde{\psi}\|/\|\tilde{\psi}\|=|\tilde{q}|$ になるからだ．$Q=e^C$としよう．その固有値は，e^{C_i}である．ただし，C_iは，Cの固有値．すると，$\|e^C\|=\max_i|e^{C_i}|=\max_i e^{\mathrm{Re}C_i}$．したがって，

$$\|e^{tC}\|=\max_i e^{t\,\mathrm{Re}\,C_i}$$

がなりたつ．したがって，Cが縮小半群の生成作用素となるための条件は，すべてのiに対して，$\mathrm{Re}C_i\leqslant 0$が成立することである．

ヒルベルト(Hilbert)空間では，固有ベクトルになりうるものが，いつもその空間にあるとは限らないので，極限(sup)としてのノルムの定義を使わなければならない．たとえば，Mを関数$\exp(-x^2)$倍だけする掛け算作用素とする，つまり，

$$M\psi(x)=e^{-x^2}\psi(x)$$

とする．明らかに$\|M\psi(x)\|\leqslant\|\psi\|$だから，$\|M\|\leqslant 1$である．つぎに，

$$\psi=\frac{N}{2}\theta\left(\frac{1}{N}-|x|\right)$$

とする．すると，

$$\|\psi\|^2=\frac{N^2}{4}\frac{2}{N}=\frac{N}{2}<\infty$$

である．すべての有限のNに対して，

$$\frac{\|e^{-x^2}\psi\|^2}{\|\psi\|^2}=\frac{N}{2}\int_{-1/N}^{1/N}e^{-x^2}\,dx>\frac{N}{2}\int_{-1/N}^{1/N}(1-x^2)\,dx=1-\frac{1}{3N^2}$$

（この不等号の証明は，(11-20)式を見よ．）しかし，十分大きなNに対しては，この値は，いくらでも1に近くなる．よって，$\|M\|=1$．しかし，ヒルベルト空間には，$M\psi=\psi$となるψが存在しない．したがって，1はMの固有値とはいえない．しかし，ヒルベルト空間には，Mに関するなにか特別な性質が残っている．それがスペクトルである．スペクトルは，リゾルベント集合の補集合として，定義される．ここで，作用素Aのリゾルベント集合とは，$(\lambda-A)^{-1}$が存在するλの集合のことである．

上では，有限次元の行列Cが，縮小半群を生成するためには，その固有値にどんな条件がかかるかを見てきた．ヒルベルト空間においては，スペクトルを使ってその条件を表現するのが一番便利である．作用素Cについての条件は，スペクトルのλに対して，$\mathrm{Re}\lambda\leqslant 0$がなりたつことである．もし，$K$の固有値（またはスペクトル）$k_i$を使って，$C=iK$と書かれるならば，これは，すべての$i$に対して$\mathrm{Im}k_i\geqslant 0$ということを意味している．もし，$e^{-tC}$も縮小半群ならば（どちらの時間方向にも発展するということ），

$$\mathrm{Im}\,k=0$$

とならなければならない．つまり，Kは，実のスペクトルしかもたない．これは，ハミルトニアンが自己随伴であるという，いつもの要求から保証される条件である．こうして，$\|e^{-it\Delta}\|=1$がなりたつが，これは，自由粒子の時間発展が，ノルムを保存するということを述べている．$A+B$が縮小半群を生成するか否かを決めるためには，$-\Delta+V$が自己随伴であるか吟味する必要がある（物理屋は，こういう煩わしいことは決してしない）．もし，自己随伴ならば，トロッター公式の条件を満足する．

上に示したように，ファインマン積分は，以上の定理によって，数学的正当性が

保証されている．履歴についての和というのは，結局，ある有限の作用素のn次のべきをとること（あるいは，その作用素のためのグリーン関数に対して，ある種の近似をn回繰り返すこと）に対応する．このように，経路積分の数学的な正当性にこだわると，ファインマン形式の直感力のようなものが，いくらか失せてしまう．

ノート

経路積分の原論文は，

R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)

である．Feynman自身が発展させた応用に力点が置かれた経路積分の説明は，

R. P. Feynman and A. R, Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965

に見られる．トロッター公式と経路積分の関係は，

E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5**, 332 (1964)

に明快に示されている．この章の付録の部分もそれにしたがった．

2章　経路に沿っての確率と確率振幅

量子力学を勉強すると，粒子が軌道に沿って移動するというようなナイーブで古典的な考えは忘れなさいと教えられる．確かに粒子は，ある瞬間にはここ，少しあとにはあちらに見つかるかもしれない．しかし，ここからあちらへ特定の経路を通って移ったと考えると矛盾と混乱が起きる．この古典的直観の放棄を迫るよい例は，2つのスリットで起きる量子干渉の実験である．電子は，スリット板のうしろのスクリーンに着くまでに，スリットの一方（または両方）を通る．スクリーンは，電子の位置を感知し，そこに干渉縞が見える．どちらの穴を通ったのかをはっきりさせようとすると，干渉縞は消えてしまう．この例は，前章で導いた経路和の考えとどのように矛盾なく説明できるだろうか．

鍵は，確率と確率振幅を区別することにある．確率論に，条件確率の規則がある．$P(a|b)$ を，事象 b が起きた条件のもとで，事象 a が起きる確率とせよ．同様に，$P(a|c)$ と $P(b|c)$ を定義する．このとき，

$$P(a|c)=\sum_b P(a|b)P(b|c) \tag{2-1}$$

が成立する．ここで，和は，事象 c と a の間に起きるすべての事象（状態）b にわたってとる．量子力学には別の規則がある．今度は，確率振幅 φ を考える．$P(b|c)$ と同じように，これも2つの状態に依存し，つぎの関係式を

$$\varphi_{ac}=\sum_b \varphi_{ab}\varphi_{bc} \tag{2-2}$$

を満たす．和は，再びすべての b についてとる．本質的な違いは，φ が確率そのものではなくその絶対値の2乗が確率と解釈されることである．この本質の深い相違については，Feynman がていねいに議論している．

このように，(2-2) 式が b についての和に書かれているからといって，系が b_1 とか b_2 等にあったというのは正しくない．それが正しいためには，$|\varphi_{ab}|^2$ について(2-1)式が使えていなければならないからだ．

経路積分にも同じ注意が必要になる．経路に関する和を見いだしたのは事実だが，

それは，系がある確率で特定の経路の上を走るという主張をするものではない．経路の確率振幅を計算して，その和をとるのである．

問題：　これらの言葉を使って，2つのスリットの実験を解析せよ．

ここで問題全体を反転させて，(2-2)式を仮説として出発し，量子力学を導くこともできる．通常(2-2)式では，有限個のスピン状態の和や，連続状態の和すらとることもある．しかし，(2-2)式から量子論のダイナミックスを得るには，はるかに大胆な和のとり方をしなければならない．いま，時刻0位置yから，時刻t位置xの点へいたる（非相対論的，スピンなし）粒子の確率振幅を求めたい．そのために，中間状態をなすすべての可能性について和をとらなければならない．つまり，その和は，$(y, 0)$から(x, t)へのそれぞれの軌跡からの寄与を含んだものでなければならない．軌跡$x(\tau)$ $(x(0)=y,\ x(t)=x)$の確率振幅を$\varphi(x(\tau))$とする．全確率振幅は，

$$\varphi_{(x,t;y,0)} = \sum_{x(\tau)} \varphi(x(\tau)) \tag{2-3}$$

である．

問題：　この解釈に加えて，波動関数$\psi(x)$が位置の確率振幅を意味することを用いて，$\varphi_{(x, t_j; y, 0)}$がグリーン関数であることを示せ．

残された問題は，$\varphi(x(\tau))$としてどんな形をとるかである．Feynmanを正しい汎関数の形に導いたのはDiracである．Diracは，その初期の論文と量子力学の教科書の中で，グリーン関数（彼自身は変換関数とよんだ）が

$$G = e^{iS/\hbar} \tag{2-4}$$

のように見えることを見いだした．ここでSはハミルトン - ヤコビ方程式の解である．いまでは，$\exp(iS/\hbar)$が，小さな$\hbar$の場合のよい近似になっていることをだれでも知っている：つまりWKBというわけだ．Diracがさらに見いだしたのは，$\exp(iS/\hbar)$は，Gの時間発展における時間間隔が，ゼロの極限に対してもよい近似になっていることである．その結果，短い時間εの間に，yからxへの時間発展関数（プロパゲータ）は，

$$\exp(iS/\hbar) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\varepsilon\left(\frac{m}{2}\left(\frac{x-y}{\varepsilon}\right)^2 - V\right)\right]$$

で近似される．(2-2)式の精神にのっとり，有限時間のプロパゲータの，中間のすべての位置について和をとれば(1-24)式が得られる．

これが，Feynmanの研究以前の主な前段的研究だと思う．

ノート

Diracの初期の論文は，

P. A. M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, **3**, No.1 (1933)

である．この論文は，Feynmanの*Rev. Mod. Phys.*誌のオリジナル論文とともに，

J. Schwinger, *Quantum Electrodynamics*, Dover, New York, 1958

に再録されている．この線に沿った他の題材が，有名な教科書

P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford, London

にある．特に，その第4版（1958年）原書31，32章，121～130ページを見よ．

通常の量子力学では，$\psi(x)$は，粒子をxに見いだす確率の振幅である．それ対応して，xは位置演算子をもち，それを使って位置を原理的に局在化させることができる．(2-3)式の$\varphi(x(\tau))$が与えられたとして，粒子が特定の軌跡をたどるかどうか決める（測定する）ことが，原理的にできるだろうか．これを行なう1つの方法が，

Y. Aharonov and M.Vardi, Meaning of an Individual " Feynman Path," *Phys. Rev*. **21**, 2235 (1980)

に示されている．

3章　経路積分の古典極限（発見法的アプローチ）

われわれは，プロパゲータを和の形

$$G(x,t;y)=C\sum_{x(\cdot)}\exp\left(\frac{iS(x(\cdot))}{\hbar}\right) \tag{3-1}$$

で求めた．ここで $x(\cdot)$ は，yから出てxに終わる経路．(3-1)式から見ると，量子力学の古典力学的極限は，ほんの一歩先である．この極限を得るには，停留位相の方法を使う．ただし，1次元積分で有効な停留位相の方法が，(3-1)式の「和」に対しても同様に，有効であると仮定する．

停留位相法では，つぎの型の積分

$$F(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\exp\left[i\lambda f(t)\right] \tag{3-2}$$

を考える．Fの極限における$\lambda\to\infty$の主な寄与を求めたい．この意味は，後の章で，次数（オーダー）記号や漸近展開を使ってもう少し正確に定義する．(3-2)式を簡単化するためのおまじないとは，以下のようなものである．大きなλに対しては，$e^{i\lambda f(t)}$の位相は，$f'=0$でないと，非常に激しく振動する．これは，積分への主要な寄与は，積分領域にあるtのうち，f'がゼロになる点からくるということを意味している．いま，1点t_0だけで，f'がゼロになるとしよう．t_0から離れた点からの寄与を無視して，fをt_0のまわりで展開する，つまり

$$F(\lambda)=\int dt\exp\left[i\lambda f(t_0)+\tfrac{1}{2}i\lambda(t-t_0)^2f''(t_0)+\cdots\right] \tag{3-3}$$

とする．$(t-t_0)$の3次以上の項を無視し，tの積分を$-\infty$から$+\infty$にひろげてとると，結果は，

$$F(\lambda)=\sqrt{\frac{2\pi i}{\lambda f''(t_0)}}\;e^{i\lambda f(t_0)} \tag{3-4}$$

となる．この操作は，fが十分おとなしい関数であれば，正しい[次頁脚注(1)]．

$f''(t_0)$ も同時にゼロになってしまうとどうなるか．この問題はおもしろく，経路積分の関連でいうと，電子光学のコースティクスを調べることなどの物理学につながっていく．あとの章で，これらを扱う．

$(t-t_0)$ についての3次，4次以上のべきに関しては，それらを無視してもよいことが，つぎのような発見方的な議論からわかる．積分

$$K(\lambda)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\lambda t^2}e^{ia\lambda t^3}e^{ib\lambda t^4}\,dt \tag{3-5}$$

を考える．$\lambda_t{}^3$ と $\lambda_t{}^4$ が，1より小さいと考えてよい領域を考え，この点を自己矛盾のないようにわれわれの論理にとりこむ．実際，それらが小さいとすると，$K(\lambda)$ は，

$$\begin{aligned}K(\lambda)&=\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\lambda t^2}\left[1+i\lambda at^3+i\lambda bt^4-\tfrac{1}{2}\lambda^2a^2t^6+\cdots\right]dt\\&=\sqrt{\frac{i\pi}{\lambda}}\left[1-\frac{3ib}{4\lambda}+\frac{i15}{16}\frac{a^2}{\lambda}+\cdots\right]\end{aligned} \tag{3-6}$$

と書き直される．ここで使った積分の公式を，章末の付録につけておいた．こうして，t の高次の項は，$\lambda\to\infty$ では，最初の項にくらべて，速くゼロにいくことがわかる．さらに，t^2 がかかっていくたびに，積分すると $1/\lambda$ が次数として追加されていく仕組みになっている．ある意味で，これは，t の有効サイズ（積分に寄与する t の範囲の長さ）が $1/\sqrt{\lambda}$ 程度だということである．このように計算すると，λt^2 は1程度，λt^3 は $\lambda^{-1/2}$ のオーダー，などとなる脚注(2)．

脚注(1)　$f'(t)\neq 0$ になっている点 t の領域を考えなくてよい理由は，以下のとおり．$\alpha\leqslant t\leqslant\beta$ で $f'(t)\neq 0$ ならば，変数変換 $z=f(t)$ を考えて

$$F_{\alpha\beta}\equiv\int_{\alpha}^{\beta}\exp(i\lambda f(t))\,dt=\int_{f(\alpha)}^{f(\beta)}\exp(i\lambda z)\varphi(z)\,dz$$

とできる．ただし，

$$\varphi(z)=\frac{1}{f'(t)}$$

φ が，微分可能だとして，部分積分を実行すると，

$$F_{\alpha\beta}=\left(\frac{1}{i\lambda}\right)[\varphi(z)e^{i\lambda z}]|_{f(\alpha)}^{f(\beta)}-\left(\frac{1}{i\lambda}\right)\int_{f(\alpha)}^{f(\beta)}\exp(i\lambda z)\left(\frac{d\varphi}{dz}\right)dz$$

となる．したがって，$F_{\alpha\beta}$ は，$1/\lambda$ と同じ程度のゼロになる．一方，(3-4)式から，$f'=0$ は $1/\sqrt{\lambda}$ 程度の寄与をするから，こちらのほうが究極的には大きい．

脚注(2)　3次以上の項は，変数変換 $f(t)-f(t_0)=z^2$（ただし $f'(t_0)=0$）を使っても消去できる．この方が展開法にくらべて，幾何学的イメージには欠けるが，厳密な証明に利用するにはよいと思う．

まとめると，$\lambda=\infty$ の極限では，積分のふるまいは $f'(t_0)=0$ となる点 t_0 だけで決まる．(3-1) 式の和にもどって，古典対応の極限が $\hbar\to 0$ ということを思いかえしてみる．つまり，関数 $S[x(\cdot)]$ に因子 $\lambda=1/\hbar$ がかかっているということになる．積分(3-2) 式の結果から(3-1) 式を見ると，プロパゲータのふるまいは，$\delta S/\delta x(\cdot)=0$ を満たす $\bar{x}(\cdot)$ で決まってくるだろう．この停留条件は，汎関数微分であることに注意されたい．これが，「作用積分が経路の変分について定常になっている」ことの正確な表現なのである．こうして，古典力学が回復され，$\bar{x}(\cdot)$ は，オイラー - ラグランジュ(Euler-Lagrange) 方程式を満たすことがわかる．

$\hbar\to 0$ の極限で確かに古典経路が重要であることはわかったが，それが古典力学自体と完全に同じものではないことには注意しておきたい．特に，それが位相項の中で現われたわけだから，同じ領域で，収束する古典経路が2つあれば，それらの間の干渉が生ずる．古典力学だけであれば，そんなことは起きようもない．

もちろん，干渉パターンが現われるためには，なにか $\hbar$ にくらべて小さい量が存在しなければならない．いま，ある（座標空間の）領域で，同じ点 ξ に収束する2つの古典経路があるとしよう．ξ に対応させて，それぞれ，古典作用積分を $S_1(\xi)$ および $S_2(\xi)$ と書く．プロパゲータは，一般形で

$$G=e^{iS_1/\hbar}+e^{iS_2/\hbar} \tag{3-7}$$

となる（実際には，それぞれの項には別の実係数がかかる）．確率分布は，$|G|^2$ で与えられるから，干渉パターンが積 GG^* の交差項から現われる．それは，

$$e^{i[S_2(\xi)-S_1(\xi)]/\hbar}$$

の実部である．逆に，S_2-S_1 の変動が $\hbar$ にくらべて大きければ，この項の速い振動のために，干渉が消える．

演習：　波動関数 ψ が，位置と運動量の期待値を，それぞれ，x_1 と p_1 にもち，それらのまわりに鋭い分布をもつものとしよう．たとえば，最小不確定性波束がそうである．この系を，ハミルトニアン $H=p^2/2m+V$ にしたがって，t_1 から t_2 へと時間発展させる．古典経路が，時刻 t_1 で x_1，p_1 から出て，t_2 に x_2，p_2 に着いたとする．$\hbar\to 0$ の極限で，時刻 t_2 の波動関数が，x_2 と p_2 に集中していることを示せ．

解（非常に発見法的なやり方）：　波動関数を

$$\psi_{x_i p_i}(x)=(2\pi\Delta^2)^{-1/4}\exp\left[-\frac{(x-x_i)^2}{4\Delta^2}+\frac{ip_i x}{\hbar}\right],\qquad i=1,2 \tag{3-8}$$

ととれ．時間間隔$T=t_2-t_1$のプロパゲータを計算したい．(3-4)式のアナロジーから，それを

$$G=Ce^{iS_c/\hbar} \tag{3-9}$$

の形になると推定しよう．ここで，S_cは，適当な境界条件の下で$\delta S=0$を満たす経路$\bar{x}$に沿って計算した作用積分の値．Cは，Sの2階微分に関連した量だけれども，その形はこの演習問題に直接関係はない．ここでは，振幅

$$A=\langle x_2 p_2|e^{-iHT/\hbar}|x_1 p_1\rangle$$

が，時刻$t=t_1$で位相空間の位置x_1，p_1を出発した粒子に対しては，時刻$t=t_1+T$だと，x_2，p_2以外ではゼロになることを示したい．(3-8)式と(3-9)式から，

$$\begin{aligned}A&=\int d\xi_2\,d\xi_1\psi^*_{x_2p_2}(\xi_2)G(\xi_2,T;\xi_1)\psi_{x_1p_1}(\xi_1)\\&=(2\pi\Delta^2)^{-1/2}\int d\xi_1\,d\xi_2 C\exp\left[-\frac{(\xi_2-x_2)^2}{4\Delta^2}-\frac{ip_2\xi_2}{\hbar}\right.\\&\qquad\left.+\frac{i}{\hbar}S_c(\xi_2,T;\xi_1)-\frac{(\xi_1-x_1)^2}{4\Delta^2}+\frac{ip_1\xi_1}{\hbar}\right]\end{aligned}$$

である．xとpの不確定さを，同じ程度の大きさにとっておくために，$\Delta^2=O(\hbar)$とするとつごうがよい．この積分の大きな寄与は，指数関数の肩が$\partial/\partial\xi_1$と$\partial/\partial\xi_2$によってゼロになる点からくる．ξ_1とξ_2を実数にしておくと，2つの別個の条件

$$\xi_2=x_2,\qquad \xi_1=x_1$$

と

$$-p_2+\frac{\partial S_c}{\partial\xi_2}=0,\qquad p_1+\frac{\partial S_c}{\partial\xi_1}=0 \tag{3-10}$$

が要求される．これから，(p_2,x_2)と(p_1,x_1)は，関数S_cによって引き起こされる正準変換によって，たがいに結ばれていることがわかる．しかし，S_cは古典力学の時間発展を生みだすから，結局，2つの点は，古典経路でつながれていることになる．どの程度強く結ばれているかは，振幅に表現されることになる．

停留位相法は，ラプラス(Laplace)法と深い関係がある．ラプラス法では，

$$G(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\exp(-\lambda g(x)) \tag{3-11}$$

を扱う．ただし，λとgは実数である．なめらかで，下から押えられているgに対して，$g'(x)=0$，$g''(x)>0$を満たす点が最大の寄与をなす．大きなλおよび最小値から離れたgでは指数関数が小さくなるから，$\lambda\to\infty$の極限では，(3-2)式のFよりも(3-11)式のGについての漸近的性質を示すほうが容易である．ラプラス法については，11章で詳しく扱う．

付録：　役に立つ積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{3-12}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-ay^2}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\left(\frac{1}{2a}\right) \tag{3-13}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-ay^2}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\left(\frac{3}{4a^2}\right) \tag{3-14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^6 e^{-ay^2}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\left(\frac{15}{8a^3}\right) \tag{3-15}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\,e^{b^2/4a} \tag{3-16}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y e^{-ay^2+by}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\left(\frac{b}{2a}\right)e^{b^2/4a} \tag{3-17}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-ay^2+by}\,dy=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\left(\frac{1}{2a}\right)\left(1+\frac{b^2}{2a}\right)e^{b^2/4a} \tag{3-18}$$

正ではないReaをもつ場合には，これらの公式は，解析接続で得られるものと解する．ややこしくなるのは，$a=0$での分岐点だけである．

ノート

漸近近似の標準的な本としては，

A. Erdelyi, *Asymptotic Expansions*, Dover, New York, 1956

がある．あとの章で，停留位相近似や漸近近似をとりあげる際に，系統的に参考文献を追加する．その段階で，本章で行った議論を経路積分に適用したら，どの程度厳密にできるか検討する．本章に出た演習問題は，経路積分に深く関係した方法，つまりトロッターー公式で，厳密に解かれている．

G. A. Hagedorn, Semiclassical Quantum Mechanics I : The $\hbar\to 0$ Limit for Coherent States, *Commun. Math. Phys.* **71**, 77 (1980)

を見よ．

4章　ベクトルポテンシャルと経路積分公式のもう1つの証明

この章では，磁場がある場合に経路積分を拡張する．この拡張には，驚くような精妙さが隠されている．また，この章では，経路積分とブラウン運動との深いつながりに，初めて出会う．

最初に，3次元への一般化をしておく必要がある．それには，(1-24)式で，すべての位置変数を太字にすることを，まじめにやればよい．積分 $d\mathbf{x}_j$ は，3次元で行ない，これにともなって規格化因子は $(m/2\pi i\hbar\varepsilon)^{3N/2}$ となる．

式のとり扱いに便利で，よく使われるということもあるので，(1-29)式を次のように書いておく，

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}) = \int_{\mathbf{y},0}^{\mathbf{x},t} d\mathbf{x}(\tau) \exp\left(\frac{iS[\mathbf{x}(\tau)]}{\hbar}\right) \tag{4-1}$$

磁場がないときには，S は

$$S[\mathbf{x}(\tau)] = \int_0^t L\left(\mathbf{x}, \frac{d\mathbf{x}}{d\tau}\right) d\tau, \qquad L = \tfrac{1}{2}m\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\tau}\right)^2 - V(\mathbf{x}) \tag{4-2}$$

の形をとることをすでに確かめてある．ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ $(\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A})$ から導かれる磁場 $\mathbf{B}$ がある場合には，(4-1)式および(4-2)式で変化するところというと，L が

$$L = \tfrac{1}{2}m\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\tau}\right)^2 + \frac{e}{c}\frac{d\mathbf{x}}{d\tau}\cdot\mathbf{A} - V(\mathbf{x}) \tag{4-3}$$

になるぐらいのことである．作用積分には

$$\frac{e}{c}\int_0^t d\tau \frac{d\mathbf{x}}{d\tau}\cdot\mathbf{A} \tag{4-4}$$

がつけ加わっているが，それはつまり

$$\frac{e}{c}\int d\mathbf{x}\cdot\mathbf{A} \tag{4-5}$$

と同値である．

(4-3) 式のラグランジアンをもつプロパゲータが正しいかどうかを確認するには，G の表式を，つぎの極限として見てやればよい．すなわち，

$$G(\mathbf{x},t;\mathbf{y})=\lim_{N\to\infty}\int d^3x_1\cdots d^3x_N\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3(N+1)/2}$$
$$\times\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j}{\varepsilon}\right)^2-V(\mathbf{x}_j)\right]+\text{ベクトルポテンシャルの項}\right\},$$
$$\varepsilon=\frac{t}{N+1} \tag{4-6}$$

((4-6) 式では，(1-24) 式と同様 $N-1$ ではなく，N 個の中間位置 $\mathbf{x}$ をとった．) (4-5) 式から，ベクトルポテンシャルの寄与は，

$$\frac{ie}{\hbar c}\sum_{j=0}^{N}(\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}) \tag{4-7}$$

ということがわかるが，$\mathbf{A}(\mathbf{x})$ を $\mathbf{x}_j$ か，$\mathbf{x}_{j+1}$ か，はたまた $(\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j+1})/2$ のように，どこかその中間で計算すべきなのか明確ではない．実際には，$\mathbf{A}$ は，中間点で計算しなければならない．中間点を選ぶことで，経路積分がシュレーディンガー方程式と同じ結果を与えることを，ここで証明しよう．そのあとで，間違った選び方の結果がどうなるかを示すことにする．証明の途中で，(1-24) 式の $V(x)$ の変数に，x_{j+1} ではなく，x_j が現われた際，なぜ問題が生じなかったかが明らかになるだろう．

磁場を扱うこの方法が正しいか，いまからチェックするが，そのやりかたは，Feynman が最初に経路積分の全体の正しさを検証したやりかたと同じものである．つまり，時刻 T の波動関数 $\psi(\mathbf{y},T)$ をとり，推定した経路積分でもって時刻 $T+\varepsilon$ まで時間発展させ，シュレーディンガー方程式と同じ結果を与えるかどうかをみるのである．その目的のために，(4-6) 式の中の極限操作を行なう量としてのプロパゲータを，$N=0$ の場合にだけ留め（つまり，1個だけの無限小ステップとし），そこにベクトルポテンシャルの寄与 $(A(\mathbf{x}_j/2+\mathbf{x}_{j+1}/2))$ を含めることにする．これで ψ を時間 ε だけ進め，つぎに ε をゼロにもっていけばシュレーディンガー方程式に含まれる $\partial/\partial t$ とくらべられる．理論が正しければ，

$$\psi(\mathbf{x},T+\varepsilon)=\int d^3y\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\varepsilon}\right)^2-V(\mathbf{y})\right]\right.$$

$$+\frac{ie}{\hbar c}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot\mathbf{A}\left(\tfrac{1}{2}\mathbf{x}+\tfrac{1}{2}\mathbf{y}\right)\bigg\}\psi(\mathbf{y},T) \tag{4-8}$$

とならねばならない．

つぎの数ステップは，例によってテイラー展開とガウス積分．変数

$$\boldsymbol{\xi}=\mathbf{y}-\mathbf{x}$$

を定義し，これを(4-8)式の積分変数とする．そこで，$\psi(\mathbf{y},T)$, $\mathbf{A}$，そしてVを$\xi=0$のまわりで展開すると，(4-8)式は，

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x},T+\varepsilon)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}&\int d^3\xi\exp\left[\frac{im\xi^2}{2\varepsilon\hbar}\right]\\ &\times\exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(\mathbf{x})-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\nabla V(\mathbf{x})\cdot\boldsymbol{\xi}+\cdots\right\}\\ &\times\exp\left\{-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{\xi}\cdot\left[\mathbf{A}(\mathbf{x})+\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla)\mathbf{A}(\mathbf{x})+\cdots\right]\right\}\\ &\times\left\{\psi(\mathbf{x},T)+\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla\psi+\tfrac{1}{2}\sum_{m,n=1}^{3}\xi_m\xi_n\frac{\partial^2\psi}{\partial x_m\partial x_n}+\cdots\right\}\end{aligned} \tag{4-9}$$

となる．以上の式が扱いやすかったのは，われわれがεについて1次だけに話を限定したからだ．それより小さな項（つまり$\varepsilon^{3/2}$）は，トロッター公式の場合と同じように，消えてしまう．積分の中の因子ξは，前章で見た$\Delta t\sim 1/\sqrt{\lambda}$の関係があったのと同じように，$\varepsilon$に関しても有効な大きさをもつ．詳しくいうと，われわれは，(4-9)式の積分を$\varepsilon\to 0$の極限で考えており，最低次の項（1の位で，厳密にキャンセルしてしまう）とεについて1次の項だけをとり，それ以上は無視した．指数関数の肩$im\xi^2/2\hbar\varepsilon$は，1のオーダーであり，したがって$\xi$が$\sqrt{\varepsilon}$のオーダーだということになる．これは，前の章で扱ったように，ガウス積分を使って厳密に表わすことができる．

最初に，$\exp(-i\varepsilon V(\mathbf{x})/\hbar)$が，上の積分から因数分解でき，$\xi$に依存しないこと，さらに$\varepsilon$の1次のオーダーで，$(1-i\varepsilon V(\mathbf{x})/\hbar)$の形に書いてもよいことに注意する．

次に，$\exp(-i\varepsilon\nabla V\cdot x/\hbar)$は，単純に落とせる．$\xi$について積分すると，たかだか$\varepsilon^{3/2}$のオーダーにしかならない．ついでにいうなら，これが，Vの変数として，$\mathbf{x}_j$をとっても$\mathbf{x}_{j+1}$でも構わないことの理由である．

その他の因子は，全部残る．$\mathbf{A}$を含む指数関数をξ^2，つまりεのオーダーまで展開する．すると，(4-9)式は，

$$\psi(\mathbf{x}, T+\varepsilon)=\left(1-\frac{i\varepsilon V(\mathbf{x})}{\hbar}\right)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\int d^3\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\varepsilon\hbar}\right)$$
$$\times\left[1-\frac{ie}{\hbar c}\xi_n A_n-\frac{ie}{2\hbar c}\xi_n\xi_m\nabla_m A_n-\frac{1}{2}\frac{e^2}{\hbar^2c^2}\xi_n A_n\xi_m A_m\right]$$
$$\times\left[\psi+\xi_l\nabla_l\psi+\tfrac{1}{2}\xi_l\xi_k\nabla_l\nabla_k\psi\right]+\varepsilon\text{について高次の項} \tag{4-10}$$

となる．(4-10) 式では，k, l, m, n のくり返し記号は1から3までの和をとるもの了解しておく．変数ξに関する対称性のために，奇数次の項や，$\xi_n\xi_l$, $n\neq l$ の形の積の積分はゼロになる．さらに，$\xi_n\xi_n$ の各項は（和をとらないで），3章(3-13)式に対する付録により

$$\sqrt{\frac{2\pi\varepsilon\hbar}{-im}}\left(\frac{2\varepsilon\hbar}{2(-im)}\right) \tag{4-11}$$

を与える．(4-10) 式の残るただ1つの交差項は，結局，$A\cdot\nabla\psi$ からきて，積分すると

$$\psi(\mathbf{x}, T+\varepsilon)=\psi-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V\psi+\frac{\varepsilon e}{2mc}\psi\nabla\cdot\mathbf{A}-\frac{i\varepsilon e^2}{2\hbar mc^2}\mathbf{A}^2\psi$$
$$+\frac{i\varepsilon\hbar}{2m}\nabla^2\psi+\frac{\varepsilon e}{mc}(\mathbf{A}\cdot\nabla)\psi \tag{4-12}$$

となる．規格化因子がキャンセルしたのは，もちろん偶然ではない．$\psi(\mathbf{x}, T)$ を左辺に移項すれば，

$$\psi(\mathbf{x}, T+\varepsilon)-\psi(\mathbf{x}, T)=\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{4-13}$$

となる．全体を ε で割り，$\hbar i$ 倍すると，結果は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{i\hbar e}{mc}(\mathbf{A}\cdot\nabla)\psi$$
$$+\frac{i\hbar e}{2mc}\psi\nabla\cdot\mathbf{A}+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi+V\psi \tag{4-14}$$

となり，これは，

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi+V\psi \tag{4-15}$$

と同じである．ただし，$\mathbf{p}$ を演算子 $-i\hbar\nabla$ ととる．したがって，経路積分によって時間発展した波動関数はシュレーディンガー方程式の解になっている．

ノート

この章は，Feynmanの原論文 [*Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)] に忠実にしたがった.

5章　伊藤積分とゲージ変換

積分

$$\int \mathbf{A}\cdot d\mathbf{x} \tag{5-1}$$

を正しく評価しないと，結果がどうなるか調べてみよう．仮に，これを，

$$\sum_{j=0}^{N} (\mathbf{x}_{j+1}-\mathbf{x}_j)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}_j) \tag{5-2}$$

と解釈したとする．こうすると，(4-9) 式のなかで，$(\xi\cdot\nabla)\mathbf{A}/2$ が$(\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla)\mathbf{A}$ に置きかわる．この置きかえが(4-12) 式まで続く結果，(4-12) 式の$(\varepsilon e/mc)\psi\nabla\cdot\mathbf{A}$ の項の係数が，1/2 から 1 になる．最終的には，よぶんな項

$$\frac{i\hbar e}{2mc}\psi\nabla\cdot\mathbf{A} \tag{5-3}$$

が，本来あってはならない項なのに，シュレーディンガー方程式につけ加わることになる．

読者は，上の注意を最大限の警告と受けとっていただきたい．リーマン積分が，数学的対象として正しく定義されているのは，基本的に，積分を近似する和

$$\sum_{j=0}^{N} (t_{j+1}-t_j)f(t_j^*) \tag{5-4}$$

が，$\max_j(t_{j+1}-t_j)\to 0$ が満たされるかぎり，点 t_j^* をどのように選ぼうとも［ただし，$t_{j+1}\geqslant t_j^*\geqslant t_j$, $t_{N+1}=b$, $t_0=a$］，すべて同じ値 $\int_a^b f(t)\,dt$ に収束するからである．

ブラウン運動の研究で伊藤 清は，よく似た問題，すなわちつぎの積分

$$\int_a^b f(x(t))\,dx \tag{5-5}$$

を定義する問題に出会った．ここで，$x(t)$ は，ブラウン運動をしている 1 個の粒子の経路．彼は，この積分を

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{j=0}^{n-1}(x_{j+1}-x_j)f(x_j),$$

$$x_j=x\left(a+\frac{j(b-a)}{n}\right),\qquad x_n=x(b)=x_b,\ x_0=x(a)=x_a \tag{5-6}$$

のように定義した．こうすることで彼は注目すべき結果

$$\int_{x_a}^{x_b}\frac{d\varphi}{dx}dx=\varphi(x_b)-\varphi(x_a)-\tfrac{1}{2}\int_a^b\frac{d^2\varphi(x(t))}{dx^2}dt \tag{5-7}$$

を見いだした．

この変わった公式は，ブラウン粒子の経路のふるまいによって説明される．Wienerは，これらの経路のほとんどすべては，連続だが，いたるところ，微分不可能であることを発見した．$\Delta x=x(t+\Delta t)-x(t)$とする．すると，ブラウン経路に対して，$(\Delta x)^2$は$\Delta t$のオーダーに対応することが知られている（この2つの量を関係づける定数が拡散係数で，(5-7)式では，それが1/2と仮定してある）．この性質は，（物理的なブラウン運動ではなく，数学的な意味において）任意の微小量Δtに対してなりたつ．速度つまりxの微分は，$\Delta x/\Delta t$だが，これは$1/\sqrt{\Delta t}$のオーダーであり，$\Delta t\to 0$の極限で無限大になる．この点に照らして，(5-7)式を見てみよう．恒等式

$$\varphi(x_b)-\varphi(x_a)=\sum_{j=0}^{n-1}\left[\varphi(x_{j+1})-\varphi(x_j)\right] \tag{5-8}$$

を考える．ここで，x_jなどの記号の意味は前と同じ．φは，おとなしくふるまう関数であると仮定する．すると，(5-8)式は

$$\varphi(x_b)-\varphi(x_a)=\sum_{j=0}^{n-1}\Big[\varphi'(u_{\theta j})(x_{j+1}-x_j)+\tfrac{1}{2}\varphi''(u_{\theta j})(x_{j+1}-x_j)^2(1-2\theta)$$
$$+O\big((x_{j+1}-x_j)^3\big)\Big] \tag{5-9}$$

と書くことができる．ここで$u_{\theta j}$は，$1>\theta>0$の下で

$$u_{\theta j}=x_j+\theta(x_{j+1}-x_j) \tag{5-10}$$

と定義される．$\theta=0$としてみよう．(5-9)式の第1項は，$n\to\infty$の極限で伊藤積分になる．しかし，大事なのは，この極限$n\to\infty$でも，第2項の和がゼロにならないことだ．$(\Delta x)^2$がΔtのオーダーなので，$\Sigma\varphi''(\Delta x)^2$の極限は$\int\varphi''dt$となり，ゼロではな

いのである．そして，これが積分(5-7)式についたよぶんの項である．もしわれわれが，$\theta=1/2$ つまり，中点規則を採用していれば，(5-7)式の異常項は現われていなかったことに注意してほしい．

量子力学では，中点規則を採用する必要があることがわかったし，どこからむずかしい点が出てきたのかも，いまになってみれば明らかである．4章で，ξの「大きさ」は$\sqrt{\varepsilon}$ であることを見た．経路積分を実行するための折れ線経路には，$(x_{j+1}-x_j)^2$ の特徴的な大きさが，$\varepsilon\,(=T/N)$ という性質ある．それゆえ，経路はブラウン運動に似ており，積分する際に，正しく実行しなければならない．

経路積分の完全な表式は

$$G(\mathbf{x},t;\mathbf{y})=\int_{(\mathbf{y},0)}^{(\mathbf{x},t)}d\mathbf{x}(\tau)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\left[\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2-V(\mathbf{x})+\frac{e}{c}\dot{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{A}\right]\right\} \tag{5-11}$$

である．$\mathbf{A}$ に

$$\mathbf{A}'=\mathbf{A}+\nabla\varphi \tag{5-12}$$

ととってゲージ変換を施そう．ここでφは，スカラーの関数．(5-12)式によって，項

$$\frac{ie}{\hbar c}\int_0^t\dot{\mathbf{x}}\cdot\nabla\varphi\,d\tau=\frac{ie}{\hbar c}\int_y^x\nabla\varphi\cdot d\mathbf{x} \tag{5-13}$$

が(5-11)式の指数関数の肩につけ加わる．われわれは，積分評価に中点規則を使っているから，(5-7)式の伊藤公式に現われたような付加項($\int\nabla^2\varphi\,dt$)はない．もし，φが，われわれの問題が定義されている3次元ユークリッド空間でおとなしくふるまうならば，

$$\int_{\mathbf{y}}^{\mathbf{x}}\nabla\varphi\cdot d\mathbf{x}=\varphi(\mathbf{x})-\varphi(\mathbf{y}) \tag{5-14}$$

を得る．この量は，すべての経路に同じである．こうして，ゲージ変換(5-12)式が，G に変換

$$G'(\mathbf{x},t;\mathbf{y})=e^{ie\varphi(\mathbf{x})/\hbar c}G(\mathbf{x},t;\mathbf{y})e^{-ie\varphi(\mathbf{y})/\hbar c} \tag{5-15}$$

を引き起こすことがわかった．しかし，これは単に，波動関数の位相の変化

$$\psi'(\mathbf{x})=e^{ie\varphi(\mathbf{x})/\hbar c}\psi(\mathbf{x}) \tag{5-16}$$

に対応するだけである．

以上で，量子力学におけるゲージ不変性を証明したことになる．経路積分では，中点規則を知っていれば，証明は2行程度ですむ．シュレーディンガー方程式から証明しようと思うと，数学的には同等でも，それほど明らかでも簡単でもない．

演習： 電場と磁場の両方のポテンシャルにゲージ変換を施して，その不変性を証明せよ．

ノート

(5-7)式は，実際に確率論的な内容を述べており，ウイーナー測度については，ほとんどいたるところ，正しい．微分可能な関数$x(t)$については，これは成立しないが，もちろんこれは，連続関数の集合の中では測度ゼロである．(5-7)式の証明は，

K. Ito, *Mem. Am. Math. Soc.*, No.4 (1951)

にある．量子力学以外の応用として，中点規則が積分の評価［すなわち，(5-9)式の$\theta=1/2$］にも使われた．

R. L. Stratonovich, *Conditional Markov Processes and their Application to the Theory of Optical Control*, American Elsevier, New York, 1968.

を見よ．

6章　積分の実行：自由粒子と2次のラグランジアン

経路積分を計算する処方箋を見ると，手のつけられない大仕事のように思ってしまう．しかし，場合によっては，100パーセント実行できることもある．

自由粒子に対しては，$V=0$，および $\mathbf{A}=0$ である． 3次元プロパゲータは，単に3個の1次元プロパゲータの積であり，ベクトルで式が混乱する点は1の積分

$$G(x,t;y)=\int_{y0}^{xt}dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2d\tau\right]$$
$$=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\int dx_1\cdots dx_N\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{j=0}^{N}(x_{j+1}-x_j)^2\right] \tag{6-1}$$

を評価したい．ただし，$x_{N+1}=x$，$x_0=y$，そして $\varepsilon=t/(N+1)$．この積分は，つぎの恒等式

$$\int_{-\infty}^{\infty}du\sqrt{\frac{a}{\pi}}\ e^{-a(x-u)^2}\sqrt{\frac{b}{\pi}}\ e^{-b(u-y)^2}=\sqrt{\frac{ab}{\pi(a+b)}}\ \exp\left[-\frac{ab}{a+b}(x-y)^2\right] \tag{6-2}$$

のおかげで簡単になる．

この公式は，指数関数のなかを平方完成すれば証明できる．式が $(x-y)$ にだけ依存しているのは，変数変換すれば明らかである．(6-2) 式を使って，(6-1) 式の x_1 について積分する．2個の因子 $(m/2\pi i\hbar\varepsilon)^{1/2}$ を含めて，これは，

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)\int dx_1\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_1-x_0)^2+\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_2-x_1)^2\right] \tag{6-3}$$

となり，それは

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(2\varepsilon)}}\ \exp\left[\frac{im}{2\hbar(2\varepsilon)}(x_2-x_0)^2\right] \tag{6-4}$$

に等しい．x_1の積分の効果は，指数関数と平方根のなかのεを2εにかえ，$(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2$を$(x_2-x_0)^2$で置きかえることである．x_2で積分すると，同じように2εを3εにかえ，指数関数のなかに$(x_3-x_0)^2$を生みだす．

これをすべてのN個の積分にわたって続ける．εは$(N+1)\varepsilon$，すなわち，ちょうどtになり，指数関数のなかに現われる距離の2乗は，$(x_{N+1}-x_0)^2$となるが，これは正に$(x-y)^2$である．もはや，Nの依存性は残っていないから，極限操作は自明で，

$$G(x,t;y)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\ \exp\left[\frac{im}{2\hbar t}(x-y)^2\right] \tag{6-5}$$

を得る．自由粒子の$(y,0)$から(x,t)へいたる古典的経路は

$$x(\tau)=y+\frac{\tau}{t}(x-y) \tag{6-6}$$

である．古典的作用は，

$$S=\int_0^t\frac{m}{2}\left(\frac{x-y}{t}\right)^2d\tau=\frac{m}{2}\frac{(x-y)^2}{t} \tag{6-7}$$

である．明らかに，(6-5)式の位相は，ちょうど古典的作用を$\hbar$で割ったものになっており，自由粒子の場合には，古典力学的経路が厳密なプロパゲータを与えることがわかる．

2番目の例として，2次関数のラグランジアンをとろう．これは，特別の場合として，調和振動子や一様力場を含む．ラグランジアンは，

$$L=\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2+b(t)x\dot{x}-\tfrac{1}{2}c(t)x^2-e(t)x \tag{6-8}$$

で，今度は，次の積分

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int_{x_at_a}^{x_bt_b}dx(\tau)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}L\,d\tau\right) \tag{6-9}$$

を評価したい．(6-9)式のなかにはある形式が隠されているとの信念をもって，以下に変数変換を行なっていく．しかし，得られる結果の当否は，シュレーディンガー方程式を適用してチェックできるので，楽観的に進んでいっても，なんの問題もない．$\bar{x}(t)$をオイラ‐ラグランジュの方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{6-10}$$

の解とする．つまり，

$$m\ddot{x}+(c+\dot{b})x+e=0 \tag{6-11}$$

で，その境界条件は，$x(t_a)=x_a$ と $x(t_b)=x_b$. また，

$$y(\tau)=x(\tau)-\bar{x}(\tau) \tag{6-12}$$

を，(6-9) 式の新しい「積分変数」とせよ．この変数変換のヤコビアンは1．これが意味するのは，もし，(6-9) 式が極限として書き下されれば，それぞれの x_j が，それを「平行移動」させた $y_j=x_j-\bar{x}(t_j)$ で置きかえられるということである．(6-9) 式の作用の項は単純である．これは，形式的に

$$\int L\,dt=S(x(\tau))=S(y(\tau)+\bar{x}(\tau))$$

$$=S(\bar{x}(\tau))+\frac{\delta S}{\delta x}\bigg|_{\bar{x}}y(\tau)+\frac{1}{2}\frac{\delta^2 S}{\delta x^2}\bigg|_{\bar{x}}y(\tau)^2 \tag{6-13}$$

とするのが一番わかりやすい．S は2次関数だから，S のテイラー展開は，2次微分までで終わる．また，S の1次変分がゼロとなるという古典経路の定義によって，S の $\bar{x}$ のまわりの1次微分はゼロである．最後に，ふたたび S が2次関数という理由で，$(1/2)\delta^2S/\delta x^2$ は，x の1次の項が消えたことを除いて，S 自身と同じ2次形式をもつ．結局，

$$S(\bar{x}+y)=S(\bar{x})+\tfrac{1}{2}\delta^2 S y^2 \tag{6-14}$$

となる．$S(\bar{x})$ は，$dy(\tau)$ についての積分から因数分解される．それぞれの $y(\tau)$ の境界条件が (6-12) 式によって，

$$y(t_a)=0$$
$$y(t_b)=0 \tag{6-15}$$

であることを考慮すると，

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a)=\exp\left[\frac{iS(x_b,t_b;x_a,t_a)}{\hbar}\right]\tilde{G}(0,t_b;0,t_a) \tag{6-16}$$

を得る．ここで，$S(x_b, t_b\,;x_a, t_a)$ は，(x_a, t_a) から (x_b, t_b) にいたる古典的経路 $\bar{x}$ に沿った作用積分であり，$\tilde{G}$ はラグランジアン $L=(1/2)m\dot{x}^2+bx\dot{x}-(1/2)cx^2$ に対するグリーン関数である．

(6-16) 式のなかの因子 $\tilde{G}(0, t_b\,;0, t_a)$ は，時間だけの関数であり，この本で最初の「厳かな」積分ということになる．いつもの定義を採用して，$\tilde{G}(0, t_b\,;0, t_a)$ は

$$\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int dy_1 \cdots dy_N \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2} \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2\varepsilon}(y_{j+1}-y_j)^2 - \frac{1}{2}\varepsilon c_j y_j^2\right]\right\} \tag{6-17}$$

と書くことができる．ただし，$c_j = c(t_j)$，$t_j = t_a + (j/N)(t_b - t_a)$であり，また，1次元問題では本質的ではないので$bx\dot{x}$の項を落とした（3次元では，$\mathbf{x}\times\dot{\mathbf{x}}$の項は物理的な重要さをもつ．練習問題として残しておいたから，あとで1次元の結果を拡張していただきたい）．

積分(6-17)式の多重性を扱うために，N次元ベクトルη

$$\eta = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \tag{6-18}$$

を定義する．(6-17)式の指数関数の中は，

$$-\eta^T \sigma \eta \tag{6-19}$$

と書ける．ここで，Tは行列の転置を意味し，σは次の行列

$$\sigma = \frac{m}{2\varepsilon\hbar i}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \bigcirc & \\ & -1 & 2 & \ddots & & \\ & & & \ddots & & \\ \bigcirc & & & \ddots & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{i\varepsilon}{2\hbar}\begin{pmatrix} c_1 & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & c_N \end{pmatrix} \tag{6-20}$$

である．

(6-17)式は，これでコンパクトに

$$\tilde{G} = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\int d^N\eta \exp(-\eta^T\sigma\eta) \tag{6-21}$$

と書くことができる．

(6-21)式を積分するには，いろいろな方法がある．ここでは，直接的にやってしまおう．積分

$$\int d^N\eta\, e^{-\eta^T\sigma\eta} \tag{6-22}$$

を考える．σは，実エルミートの$\tilde{\sigma}$を使って，$i\tilde{\sigma}$の形に書くことができる．したがってσはユニタリー行列で対角化できる，すなわち

$$\sigma = U^{\dagger}\sigma_D U \tag{6-23}$$

ここで，σ_Dは，σの固有値（σ_αとする）をもつ対角行列で，Uはユニタリー．実数の固有ベクトルに対しては，Uも実．$\zeta = U\eta$とせよ．ベクトルζは，実で，N次元ベクトル空間$\{\zeta\}$を張る．$|\det U| = 1$だから，$d^N\eta$から$d^N\zeta$への変換のヤコビアンは1である．したがって，ゼロ固有値をもたないとすると，

$$\int d^N\eta\, e^{-\eta^T\sigma\eta} = \int d^N\zeta\, e^{-\zeta^T\sigma_D\zeta} = \prod_{\alpha=1}^{N}\sqrt{\frac{\pi}{\sigma_\alpha}} = \frac{\pi^{N/2}}{\sqrt{\det\sigma}} \tag{6-24}$$

を得る．もし，ゼロ固有値があれば，積分そのものが存在しない．$\det\sigma$は，よく知られた方法で求まる．いまの興味は，

$$\tilde{G}(0, t_b; 0, t_a) = \lim_{N\to\infty}\left[\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{N+1}\frac{\pi^N}{\det\sigma}\right]^{1/2}$$

$$= \lim_{N\to\infty}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar}\cdot\frac{1}{\varepsilon}\cdot\frac{1}{\left(\dfrac{2i\hbar\varepsilon}{m}\right)^N\det\sigma}\right]^{1/2} \tag{6-25}$$

にある．そこでf

$$f(t_b, t_a) = \lim_{N\to\infty}\left[\varepsilon\left(\frac{2i\hbar\varepsilon}{m}\right)^N\det\sigma\right] \tag{6-26}$$

を定義する．(6-20)式から，

$$\left(\frac{2i\hbar\varepsilon}{m}\right)^N\det\sigma = \det\left\{\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \bigcirc \\ -1 & 2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & -1 \\ \bigcirc & & & -1 & 2 \end{pmatrix} - \frac{\varepsilon^2}{m}\begin{pmatrix} c_1 & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & c_N \end{pmatrix}\right\} \equiv \det\sigma'_N \equiv p_N \tag{6-27}$$

となる．ここで，σ'_Nは，上の中括弧のなかの行列で定義されている．最初に，この行列の$j\times j$までを切りとった小行列σ'_j（その行列式はp_j）を定義する．ただし，εは$(t_b-t_a)/(N+1)$のままにとってある．最初のj番目までの行と列は，σ'_Nのそれと同じものである．σ'_{j+1}をその小行列式で展開すると，p_jに関する漸化式

$$p_{j+1}=\left(2-\frac{\varepsilon^2}{m}c_{j+1}\right)p_j-p_{j-1},\qquad j=1,\ldots,N \tag{6-28}$$

を得る．ただし，$p_1=2-\varepsilon^2c_1/m$で，p_0は1と決める．(6-28)式を

$$\frac{p_{j+1}-2p_j+p_{j-1}}{\varepsilon^2}=-\frac{c_{j+1}p_j}{m} \tag{6-29}$$

のように書き直すと，p_Nは，微分方程式を解いて求めることもできることがわかる．

$$\varphi(t)=\varepsilon p_j \tag{6-30}$$

と置く．ただし，$t=t_a+j\varepsilon$．(6-29)式で$\varepsilon\to0$の極限をることは，$\varphi(t)$がつぎの微分方程式

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2}=-\frac{c(t)}{m}\varphi \tag{6-31}$$

を満たすことを意味する．φの初期値は，

$$\varphi(0)=\varepsilon p_0\to0$$

$$\frac{d\varphi(0)}{dt}=\varepsilon\left(\frac{p_1-p_0}{\varepsilon}\right)=2-\frac{\varepsilon^2}{m}c_1-1\to1,\qquad N\to\infty \tag{6-32}$$

である．したがって，$f(t_b,t_a)=\varphi(t_b)$は，微分方程式

$$m\frac{\partial^2f(t,t_a)}{\partial t^2}+c(t)f(t,t_a)=0 \tag{6-33}$$

を初期条件

$$f(t_a,t_a)=0,\qquad \frac{\partial f}{\partial t}(t,t_a)\bigg|_{t=t_a}=1 \tag{6-34}$$

の下で解いて得られる．こうして，(6-8)式で与えられる2次のラグランジアンに対するグリーン関数の最終形にいたる．すなわち，

$$G(x_b,t_b;x_a,t_a)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar f(t_b,t_a)}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_c(x_b,t_b;x_a,t_a)\right] \tag{6-35}$$

である．ここで，S_cは古典軌道に沿ってとった作用積分．また，fは，(6-33)式と(6-34)式で与えられる．

演習：　与えられた2点間をつなぐ古典的経路が2本以上ありうるのは，どういう場合か．

演習：　自由粒子の解(6-5)式が，(6-35)式の特別な場合になっていることを示せ．

つぎに，上の結果を単純な調和振動子の場合を例として，具体的に見てみよう．この場合，$e(t)\equiv 0$ かつ，$c(t)\equiv m\omega^2=$ 定数．(6-33)式と(6-34)式は，簡単に解けて，

$$f(t_b, t_a)=\frac{\sin\omega T}{\omega} \tag{6-36}$$

となる．ただし，$T=t_b-t_a$．古典経路に沿った$S(x_b, t_b; x_a, t_a)$の評価はもう少しやっかいだが，演習問題として残しておこう．

演習：　$L=(1/2)m\dot{x}^2-(1/2)m\omega^2x^2$ に対して，(x_a, t_a)と(x_b, t_b)（ただし$T=t_b-t_a$）を結ぶ古典経路の作用積分は，

$$S(x_b, t_b; x_a, t_a)=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[\left(x_b^2+x_a^2\right)\cos\omega T-2x_a x_b\right] \tag{6-37}$$

となることを示せ．厳密なグリーン関数は，したがって，

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}} \times\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[\left(x_b^2+x_a^2\right)\cos\omega T-2x_a x_b\right]\right\} \tag{6-38}$$

と得られる．

一様力場中の粒子はずっと簡単である．ラグランジアンは，

$$L=\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2-ex \tag{6-39}$$

［したがって，$e(t)\equiv e=$ 定数］．そして，

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) =\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x_b-x_a)^2}{2T}-\tfrac{1}{2}eT(x_b+x_a)-\frac{e^2T^3}{24m}\right]\right\} \tag{6-40}$$

が簡単に示せる（Feynman-Hibbsの(3-62)式の誤植に注意）．最後に，結果だけを引用しておくと

$$L=\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{m\omega^2}{2}x^2-e(t)x \tag{6-41}$$

関数 $f(T)$ は，$e(t)$ が f に影響しないので，(6-36) 式で与えられたものと同じになる．一方，古典的作用積分は，

$$S(x_b, t_b; x_a, t_a) = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\Bigg[(x_b^2 + x_a^2)\cos\omega T - 2x_a x_b - \frac{2x_b}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} e(t)\sin\omega(t - t_a)\,dt - \frac{2x_a}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} e(t)\sin\omega(t_b - t)\,dt - \frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t} e(t)e(s)\sin\omega(t_b - t)\sin\omega(s - t_a)\,ds\,dt\Bigg] \tag{6-42}$$

となる．

演習：　3次元中の荷電粒子が，つぎの場のなかで運動しているとき，(時間依存の) グリーン関数の閉じた形を求めよ．

(a)　一様電場

(b)　一様磁場

(b)の場合の解：　場 $\mathbf{B} = B\hat{\mathrm{B}}$ について，質量 m，電荷 e，光速 $c=1$，$\hbar=1$，$\omega = eB/m$，$\mathbf{r} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ として，

$$G(\mathbf{x}_2, t; \mathbf{x}_1, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i t}\right)^{3/2}\frac{\omega t}{2}\csc\frac{\omega t}{2} \cdot \exp\left\{\frac{im}{2}\left[\frac{\omega}{2}\cot\frac{\omega t}{2}(\hat{\mathrm{B}}\cdot\mathbf{r})^2 - \omega\hat{\mathrm{B}}\cdot\mathbf{x}_2\times\mathbf{x}_1 + (\hat{\mathrm{B}}\cdot\mathbf{r})^2\right]\right\}$$

ノート

2次のラグランジアンを扱う方法は大量にあって，経路積分の初期の頃からよく発展している．奇妙なことに，これに関する論文が発表され続けており，知識の不拡散という意味で，科学史によい題材を提供するといってもよいくらいだ．本書での2次のラグランジアンのとり扱いは，

I. M. Gelfand and A. M. Yaglom, *J. Math. Phys.* **1**, 48 (1960)

E. W. Montroll, *Commun. Pure and Appl. Math.* **5**, 415 (1952)

と類似のものである．ほかにも方法はいくらでもあり，経路積分への紹介を意図した記事なら，どんなものでもこの章の結果の導出を行なっているはずである．

付録：古典軌道の和をとることの厳密性について

この章で評価したすべての経路積分は，古典力学的経路を使って完全に記述できた．従来，厳密かつ閉じた形で得られたプロパゲータは，どれも古典経路だけの和で書かれている．すべてのプロパゲータは，厳密に古典経路だけの和で与えられると主張する文献も現われている．われわれは時間依存のプロパゲータを議論していることを思いだしてほしい．したがって，トンネル効果は固定されたエネルギーでの現象なので，ただちに上の主張の反例にはならない．しかし，15章と16章で，コースティックス近傍のプロパゲータがゼロにならないこと，したがって，古典経路が侵入できない領域（影の領域）においてすらプロパゲータが値をもつこと，を数学的に示す．ここで古典経路が存在しないのは，エネルギーを固定しているからではなく，コースティックスを生みだしうるポテンシャルが，軌道を集中させる（焦点）効果をもっていることの帰結なのだ．これ以外にも反例が示唆されている．脚注(1)

この章で見たように，古典経路上の和が厳密になっている場合のラグランジアン（またはハミルトニアン）は，座標とその微分に関してたかだか2次の項までしか含んでいない．これは，後でWKB法を扱う際にも明らかになるであろう．そこでも，2次のラグランジアンでは，作用積分の3次変分$\delta^3 S$をはじめとして，すべての高次の変分が自動的にゼロになっている．

古典経路上の和が厳密になっているもう1つの物理的状況は，粒子を完全反射するような壁がつくる単純な幾何学に限定されている場合である．自明な例としては，自由粒子が，$x<0$では$V(x)=+\infty$となるポテンシャルに支配されていて，正のx軸だけに限定されている場合がある（yとzは無視）．このとき，プロパゲータは

$$G(b,T;a,0)=\sqrt{\frac{1}{2\pi iT}}\left[e^{i(b-a)^2/2T}-e^{i(b+a)^2/2T}\right] \qquad (6\text{-}43)$$

である．ここで，便宜上，$\hbar=m=1$ととった．この式の証明については(9-38)式のあとの議論を見ていただきたい．(6-43)式の2つの項は，時間Tの間にaとbとをつなぐ2本の古典経路に対応している：1つは，直接つながる経路で作用積分が$(b-a)^2/2T$，もう1つは壁に反射してつながる経路で作用積分は$(b+a)^2/2T$．経路積分で難しいのは，反射経路による(6-43)式第2項の負号だけである．ターニングポ

脚注(1)　E.Nelsonは，次の反例を与えた．なめらかで小さな領域以外ではゼロであるポテンシャルVを考える．Vが値をもつ領域からははるかに離れてはいるが，しかし相互には近い2点を選ぶとする．十分短い時間に対しては，この2点間の古典経路はVの影響を感じない．にもかかわらず，任意の短い時間に対して，プロパゲータがVの影響を受けることがわかっている．

イント（折り返し点）が関与すると，相対位相$\pi/2$が出てくる可能性がある．しかし，1次元では，位相πの起きようがない．この符号を決めることに関連して，2ないし3次元のなかに置かれた障害物体のまわりの波動のように，むずかしい問題に役立つ特別な方法がある．まず，正の実軸をもう1つそれ自身の上にコピーして，原点で張りあわせて，そこで折り返す（つまり，鏡像をつくる）．張りあわされているところでなにが起きるのかは無視して，つまり壁がないと思って（多次元だと，物体表面に沿って波が起きる），元の点aから新しい空間に写像された到着点（点bの写像点）までの古典経路を計算する．この経路のプロパゲータとab間の直接経路のプロパゲータを足しあわせる．2つのプロパゲータの相対符号は，障害物体での境界条件によって決まる．境界（この場合$x=0$）で，波動関数がゼロの場合の境界条件では，2つのプロパゲータを引き算でつなげばよいし，波動関数の微分がゼロの境界条件では，足し算でつなげばよい．

この規則は，実際正しいのだけれども，純粋に経路積分から導かれていないので，潔癖な人は当惑するかもしれない．経路和の手続きで起きる変化は，単に，積分形

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N$$

の積分範囲が$x_i>0$，$i=1, \ldots, N$となることだけである．これだけで正しい結果が十分再現するかどうか明らかではない．というのは，どんな時間刻み幅をとっても，微小プロパゲータに対してさえ，直接と反射のどちらの経路にも必要なxの領域があるかもしれないからである．

このように困難があるにもかかわらず，プロパゲータは古典経路しか含まない．というわけで，電磁気学で鏡像の原理がうまくいくような幾何学的状況では，古典経路和が厳密なプロパゲータを与える，といってよいようである．

古典経路和が厳密になる状況が，もっと微妙だが，もう1つある．それは，リー群の群多様体上における自由運動のグリーン関数である．最初に$SU(2)$については実際にそうであることが発見され，当時，より大きなクラスの群多様体についても成立すると予想された．ついで，Dowkerがより大きなあるクラスの群多様体についての結果を証明した．しかし和の厳密性は，$S^2=SU(2)/U(1)$のように等質空間では，一般には正しくない．曲がった空間上の経路積分についての詳しい議論は24章で行なう．他の場合には，経路の厳密な和は，ある意味では自明であるが，大きな$g_{\mu\nu}$や曲率をもった空間における経路積分の場合は，なにか違ったもののように見えることだけを注意しておきたい．もちろん群多様体の経路積分が自明に見える

ようにするには，正しい座標が必要であることを意味しているにすぎないかもしれない．また，調和振動子様のポテンシャルを群多様体上で定義し，閉じた形のグリーン関数を求めることも可能かもしれない．

最後に，ソリトンモードと大域的不変性をもつ系，および，それらの系が厳密な半古典「近似」をもつ可能性があるという29章の見解を参照していただきたい．

ノート

古典経路だけを使ったプロパゲータの表式は，

M. Clutton-Brock, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **61**, 201 (1965)

にある．反射物体が存在する場合のグリーン関数の計算は，

V. S. Buslaev, in *Topics in Mathematical Physics,* Sh. Birman, Ed., Consultants Bureau, New York, 1967, p.67

でなされた．*SU*(2) 上で古典経路の和に関する厳密性の証明は，

L. S. Schulman, *Phys. Rev.* **176**, 1558 (1968)

に示されている．リー群多様体上での古典経路の和については，

J. S. Dowker, *J. Phys. A* **3**, 451 (1970)

J. S. Dowker, *Ann. Phys.* **62**, 561 (1971)

にそれぞれ載っている．

7章　グリーン関数の性質；ファインマン-カッツ公式

この章では，グリーン関数の性質をさらに調べる．(6-38)式のような式，つまり特定の力学系に対して，あらわな形でしかも閉じた形で書かれたグリーン関数が含む情報について，全体的な見通しを得ることができる．

演算子の形式では，時間依存のグリーン関数は，Hを時間に依存しないハミルトニアンとして，

$$G(t)=\theta(t)e^{-iHt/\hbar} \tag{7-1}$$

である．$\{G(t)|t>0\}$の全体は，

$$G(t+s)=G(t)G(s) \qquad t,s>0 \tag{7-2}$$

を満たす．あるいは，座標表示で書けば，

$$G(x,t+s;y,0)=\int dz\,G(x,t;z,s)G(z,s;y,0) \tag{7-3}$$

このなんでもない式が，首尾一貫した理論体系に要求される重要な性質を表わしている．経路積分からブラウン運動に目を転ずると，これは，チャプマン - コルモゴロフの式として知られている（詳しくは，Kacの本を見よ）．量子力学では，プロパゲータの定義にこの事実が暗黙のうちに含まれている．

エネルギー固有関数

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle \tag{7-4}$$

$|n\rangle$, $n=0, 1, \ldots$の完全系があるとしよう．これらは，波動関数に対応する．すなわち，

$$u_n(x)=\langle x|n\rangle \tag{7-5}$$

明らかに，$t>0$に対して

$$G(x,t;y,0)=\langle x|G(t)|y\rangle=\sum_n\langle x|n\rangle\langle n|e^{-iHt/\hbar}|y\rangle$$

$$= \sum_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} u_n^*(y) \tag{7-6}$$

である．時間依存のグリーン関数に関するこの公式から，エネルギーレベルや波動関数といった，よりなじみの深い情報をとりだす手がかりが得られる．

(7-1)式のフーリエ変換，

$$\tilde{G}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izt/\hbar} G(t)\, dt = \int_0^{\infty} e^{i(z-H)t/\hbar}\, dt \tag{7-7}$$

も興味深い．Im $z>0$ に対して，

$$\tilde{G}(z) = \frac{i\hbar}{z-H} \tag{7-8}$$

である．Im $z=0$ における特異点は，H のスペクトルが実であることによる．(7-6)式をフーリエ変換すると，

$$\tilde{G}(x, y; z) = i\hbar \sum_n \frac{u_n(x) u_n^*(y)}{z-E_n} \tag{7-9}$$

を得る．こうして，離散スペクトルについて，グリーン関数の極から束縛状態を，そして，その留数から波動関数を決めることができる．H の連続スペクトルに対しては，G は切断をもつ．これらはみな，通常の量子力学でなじみのことだろうと思う．

(7-6)式からファインマン - カッツ公式が導かれる．この公式は，時間依存グリーン関数の $t\to -i\infty$ における漸近的ふるまいを，基底状態のエネルギーレベルに関係づける．(7-6)式で，$y=x$ としてから，1次元でも多次元の場合でも，すべての x について積分する．エネルギー固有関数の規格化により，結果は，

$$\int dx G(x, t; x, 0) = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \int dx |u_n(x)|^2 = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \tag{7-10}$$

となる．この式を，$it/\hbar = \tau$ で定義される虚数時間 t で考える．大きな正の τ に対して，(7-10)式の右辺の和は，最低エネルギーレベルによる $\exp(-\tau E_0)$ に支配される．したがって，縮重していない基底状態に対しては，

$$\lim_{\tau\to\infty} e^{E_0 \tau} \int G(x, -i\hbar\tau; x, 0)\, dx = 1 \tag{7-11}$$

が得られる．[縮重している場合には，(7-11)式の右辺に，縮重度が現われる．] 離散状態が存在していない場合には，連続状態の最低値をひろうことになる．τ の極限をとる前に対数をとると，(7-11)式のかわりに

$$E_0 = -\lim_{\tau\to+\infty} \frac{1}{\tau} \log \int dx G(x, -i\hbar\tau; x, 0) = \lim_{\tau\to\infty} \frac{-1}{\tau} \log \mathrm{Tr}\, e^{-\tau H} \tag{7-12}$$

を得る．これが，ファインマン - カッツ公式であって，基底状態のエネルギーを計算するのにきわめて有用である．グリーン関数の細かいことが全部わかっている必要は

なく，特定の漸近極限がわかっていればよい．

例として，調和振動子を考えよう．グリーン関数は，

$$G(x,t;y)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}}\ \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega t}\left[(x^2+y^2)\cos\omega t-2xy\right]\right\} \quad (7\text{-}13)$$

と与えられている．一方，(7-6)式によって，これは，

$$G(x,t;y)=\sum_n e^{-iE_nt/\hbar}u_n(x)u_n^*(y) \quad (7\text{-}14)$$

と同等のはずである．ここで，$u_n(x)$ は調和振動子の規格化された波動関数で，エルミート多項式を含んでいる．(7-10) 式からエネルギーレベル E_n を引きだすには，つぎのようにすれば簡単である．(7-13) 式の跡（トレース）はガウス積分を含んでおり，すぐ実行できる．つまり，

$$\begin{aligned}\sum_n\exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)&=\int dxG(x,t;x)\\&=\int dx\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}}\ \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega t}\cdot 2x^2(\cos\omega t-1)\right\}\\&=\frac{1}{2i}\left(\sin\frac{\omega t}{2}\right)^{-1} \end{aligned}\quad (7\text{-}15)$$

サイン関数の逆数を

$$\begin{aligned}\frac{1}{2i}\left(\sin\frac{\omega t}{2}\right)^{-1}&=\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}i\omega t\right)}{1-\exp(-i\omega t)}\\&=\exp\left(-\tfrac{1}{2}i\omega t\right)\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-in\omega t)\end{aligned}$$

の形に書いて（発散する場合には，必要なところに適当な小さい虚数をつけておく），(7-15)式の最左辺とくらべると，

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \qquad n=0,1,\ldots \quad (7\text{-}16)$$

となる．Feynman-Hibbs の本では，トレースをとらずにグリーン関数を展開しており，波動関数の情報も同時に計算している．

自由粒子を使って，上で述べた要点をもう一度説明してみよう．前に見たように，グリーン関数は

$$G(x,t;0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\ \exp\left[\frac{imx^2}{2\hbar t}\right] \quad (7\text{-}17)$$

である．そのフーリエ変換は，

$$\tilde{G}(E)=\int_0^{\infty} dt \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\ \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(Et+\frac{mx^2}{2t}\right)\right] \tag{7-18}$$

である．これを計算するには，つぎの恒等式（章末付録を見よ）を使い，

$$\int_0^{\infty} du\, e^{-(a/u^2)-bu^2}=\sqrt{\frac{\pi}{4b}}\ e^{-2\sqrt{ab}} \tag{7-19}$$

ここで，変数変換 $u^2=t$ を使った．こうして，

$$\tilde{G}(E)=\sqrt{\frac{m}{2E}}\ e^{i|x|\sqrt{2mE}/\hbar} \tag{7-20}$$

がでる．これは，E 面上で $E=0$ におけるよく知られた分岐点を与える．どこに分岐点の切断が走っているかは，まさに，(7-19) 式に対して切断がどう定義されているかによる．(7-19) 式を導いたときには，a と b が正の実で，切断の位置が開いていると仮定した．

演習1：　ファインマン - カッツ公式を使って，調和振動子の基底状態のエネルギーと波動関数を求めよ．

(7-12) 式で，トレースをとることが本質というわけではない．Tr G とするかわりに，基底状態の波動関数がゼロとはならない点での G そのものを使うこともできる．この自由度は，ほかのレベルの情報を取りだすことに利用することもできる．1次元のスピンなしの粒子に対して，$V(x)=V(-x)$ を想定しよう．このときには，その基底状態(ψ_0) は対称，第1励起状態(ψ_1) は反対称である．そこで

$$G(x,t;y,0)-G(-x,t;y,0)=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)\left[\psi_n(x)-\psi_n(-x)\right]\psi_n^*(y)$$

を考える．$it=\tau$，$t\to+\infty$ のときに，これらのグリーン関数の差に一番効くのは，E_1 からの寄与である．

演習2：　この方法を使って調和振動子の第1励起状態のエネルギーを見つけよ．

演習3：　無限に深い井戸($x=0$ と $x=a$ に壁がある）の中に閉じこめられた質量 m

の粒子のプロパゲータは，

$$G(x,t;y)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[\exp\left(\frac{im(x-y+2na)^2}{2\hbar t}\right)\right.$$
$$\left.-\exp\left(\frac{im(x+y+2na)^2}{2\hbar t}\right)\right]$$

であることを示せ．これを，Gの固有関数展開形と関係づけよ．［ヒント：(23.11)式と(23-13)式を見よ.］

付録：　積分の評価

積分

$$\int_0^\infty e^{-(a/u^2)-bu^2}\,du \tag{7-21}$$

を計算したい．$y=u\sqrt{b}$ および $c=\sqrt{ab}$ とせよ．すると(7-21)式は，

$$f(c)=\frac{1}{\sqrt{b}}\int_0^\infty e^{-(c^2/y^2)-y^2}\,dy \tag{7-22}$$

に等しい．bを定数として，cについて微分せよ．つまり，

$$\frac{\partial f}{\partial c}=\frac{1}{\sqrt{b}}\int_0^\infty dy\left(\frac{-2c}{y^2}\right)e^{-(c^2/y^2)-y^2} \tag{7-23}$$

$z=c/y$ と変数変換し，積分限界の変更によって符号がつけ加わることに注意すると，

$$\frac{\partial f}{\partial c}=-\frac{2}{\sqrt{b}}\int_0^\infty e^{-z^2-(c^2/z^2)}\,dz=-2f(c) \tag{7-24}$$

となる．（fがcに対してなめらかであると仮定すると）ただちに

$$f(c)=f(0)e^{-2c} \tag{7-25}$$

が得られる．しかし，$f(0)$がガウス関数なので，結局(7-19)式が得られる．

ノート

チャップマン - コルモゴロフ方程式については，

M. Kac, *Probability and Related Topics in the Physical Sciences*, Interscience, New York, 1959

のIV.1-3章を見よ．場の量子論におけるファインマン - カッツ公式については，

J. Gimm and A. Jaffe, Functional Integral Methods in Quantum Field Theory, in M. Levy and P. Mitter, Eds, *New Developments in Quantum Mechanics and Statistical Mechanics; Cargese 1976*, Plenum, New York, 1977

参照．ここでは，(7-12)式をファインマン - カッツ公式とよんでいるけれども，ファインマン - カッツ公式という言葉を，もっと一般的な関係，すなわち，汎関数積分としてのプロパゲータの表式の意味で使っている人も多い．この章で述べた方法で，エネルギーや波動関数を導くのにグリーン関数を使った応用例は多い．たとえば，

M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, *J. Math. Phys.* **13**, 1070 (1972) (for the Coulomb potential)

M. J. Goovaerts, A. Babcenco, and *J. T. Devreese, J. Math. Phys.* **14**, 554 (1973) (for the delta function potential)

M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967) (for the Coulomb potential)

D. C. Khandekar and S. V. Lawande, *J. Math. Phys.* **16**, 384 (1975) (for $V=(1/2)\omega(t)^2x^2+g/x^2$)

本書のあとのほうでも，もっとたくさん例が出てくる．

8章　汎関数微分と交換関係

経路積分を使うと，汎関数演算を量子力学に特に便利な形でもちこむことができる．

はじめに，汎関数微分を定義しよう．$F[x(\tau)]$ を汎関数とせよ．F の「微分」という以上

$$F\left[x(\tau)+\eta(\tau)\right]-F\left[x(\tau)\right] \tag{8-1}$$

のなにかに関連したことに違いない．ここで，$\eta(\tau)$ は，「小さい」関数．もし仮に，F が N 変数，たとえば x_i, $i=1$, …, N の関数だとしよう（η_i に対しても同じように定義する）．すると，(8-1)式は，

$$F(x_1+\eta_1, x_2+\eta_2, \ldots)-F(x_1, x_2, \ldots)=\sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i}\eta_i \tag{8-2}$$

と書けるであろう．こうして，σ の関数の関数としての汎関数微分 $\delta F/\delta x(\sigma)$ が定義できる．つまり，「小さい」η に対して

$$F\left[x(\tau)+\eta(\tau)\right]-F\left[x(\tau)\right]=\int \frac{\delta F}{\delta x(\sigma)}\eta(\sigma)\,d\sigma \tag{8-3}$$

である．(8-3)式は単に(8-2)式の一般化にすぎないので，積の微分，部分積分などの通常の規則も，汎関数微分に対して導くことができる．

$\exp[iS[x(\tau)]/\hbar]$ は実数の重み関数ではないが，一種の「期待値」を定義するのに使うことができる．汎関数 F に対して，

$$\langle F\rangle_S=\int dx(\tau)F\left[x(\tau)\right]\exp\left[\frac{iS\left[x(\tau)\right]}{\hbar}\right] \tag{8-4}$$

とする．(8-4)式で，$x(\tau)$ を並進移動しても構わないことに注意する．というのは，$dx(\tau)=d[x(\tau)+\eta(\tau)]$ としても，積分は変わらないから．よって，

$$\begin{aligned} 0&=\int dx(\tau)\left\{F(x+\eta)e^{iS(x+\eta)/\hbar}-F(x)e^{iS(x)/\hbar}\right\} \\ &=\int dx(\tau)\int d\sigma\left[\frac{\delta F}{\delta x(\sigma)}+F\frac{i}{\hbar}\frac{\delta S}{\delta x(\sigma)}\right]e^{iS/\hbar}\eta(\sigma)+\mathrm{O}(\eta^2) \end{aligned} \tag{8-5}$$

のはずだ．しかし，ηは任意だから

$$\left\langle \frac{\delta F}{\delta x(\sigma)} \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar}\left\langle F\frac{\delta S}{\delta x(\sigma)} \right\rangle_S,\quad \text{すべての}\sigma\text{に対して} \tag{8-6}$$

が結論される．この結果は重要で，離散形にも書くことができる．ここでは，$x(\tau)$は，折れ線経路$x_1, \ldots, x_N$を表わす．経路積分の定義の極限操作$N\to\infty$は，まだとっていない．そうすると，

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_k} \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar}\left\langle F\frac{\partial S}{\partial x_k} \right\rangle_S \tag{8-7}$$

が得られる．いま，期待値——経路積分——は，有限個の積分しか含んでいないことに注意せよ．そこで

$$S=\int\left[\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)\right]d\tau\rightarrow\sum_{k=1}^{N}\left[\tfrac{1}{2}\frac{mN}{t}(x_{k+1}-x_k)^2-\frac{V(x_k)t}{N}\right] \tag{8-8}$$

と書き直すと，(8-7)式は($\varepsilon=t/N$)，

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_k} \right\rangle_S = \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left\langle F\left\{m\left[\frac{x_{k+1}-2x_k+x_{k-1}}{\varepsilon^2}\right]+\frac{\partial V}{\partial x}(x_k)\right\}\right\rangle_S \tag{8-9}$$

となる．

Fをいろいろにとることによって，興味ある結果がたくさん得られる．たとえば，$F\equiv1$とせよ．(8-9)式の左辺は消え，（連続変数表示に戻って）

$$\langle m\ddot{x}\rangle_S=-\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle_S \tag{8-10}$$

を得る．これは，kの任意性からすべての時間について成立する．(8-10)式は，エーレンフェストの定理の1つの表現である．

演習：　(8-10)式を通常の量子力学とくらべたときに，$\ddot{x}$にどんな意味をもたせることができるか？　$\langle(x_{k+1}-x_k)/\varepsilon\rangle_s$と$\dot{x}=i[H, x]/\hbar$の関係を正当化できるか？

ヒント：　つぎの関係式を思いだせ．

$$\langle x_k\rangle_S=\langle x(t_k)\rangle_S=\langle x_{\text{final}}|\exp[-i(t-t_k)H/\hbar]x_{\text{operator}} \times\exp[-it_kH/\hbar]|x_{\text{initial}}\rangle.$$

今度は，Fを適当なkに対してx_kととってみよう．すると，(8-9)式は，

$$\langle 1\rangle_S=\frac{i}{\hbar}\left\langle mx_k\left[\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}-\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right]+\varepsilon x_kV'(x_k)\right\rangle_S \tag{8-11}$$

を意味する．$\varepsilon\to 0$ の極限では，V'を含む項は消えて，その結果，

$$m\left\langle x_k\frac{(x_{k+1}-x_k)}{\varepsilon}\right\rangle_S \tag{8-12}$$

が

$$m\left\langle x_k\frac{(x_k-x_{k-1})}{\varepsilon}\right\rangle_S \tag{8-13}$$

とは，異なるということになる．これらは，x と $m\Delta x/\varepsilon=m(x_{k+1}-x_k)/\varepsilon$ が計算される時刻でのみ異なる．しかも，その差が1だということは，$m(x_{k+1}-x_k)/\varepsilon$ が運動量演算子と同じものであり，(8-11)式は交換関係と解釈できることを示唆している．早い時刻の演算子を先にかける（施す）という，演算子の積の順序を使うことにすれば，(8-11)式は見慣れた関係式 $-i\hbar=[p, x]$ と同じものである．

運動量演算子を使う際の計算規則には，きわどい点がある．たとえば，普通，運動量エネルギーといえば，

$$\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle_S \tag{8-14}$$

と書くことができると思うだろう．しかし，それは

$$\tfrac{1}{2}m\left\langle\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)^2\right\rangle_S \tag{8-15}$$

を計算することにはならない．こういうタイプの積分は，われわれはすでに経験しており，$\langle(x_{k+1}-x_k)^2\rangle_s$ が値 ε を与えることがわかっている．すると，ε^2 で割る部分から(8-15)式に無限大が起きてしまう．これを回避する仕掛けとして，運動量エネルギーを

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{2m}\langle p(t+\varepsilon)p(t)\rangle_S \tag{8-16}$$

ととる．これは，

$$\tfrac{1}{2}m\left\langle\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)\left(\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right)\right\rangle_S \tag{8-17}$$

を計算せよ，ということである．こうすると実際，運動量エネルギーの正しい形になる．

上の議論に関連して，ファインマン経路積分が，演算子積の順序の問題を解決すると思っている人がいる．たとえば，古典量 p^5x^3 が与えられているとして，それに対応する量子力学演算子の積の順序はいくつも可能である．だが，経路積分に戻ると，p^5x^3 は古典的は問題なく定義された量だから，経路積分に代入するときの演算

子の選択がうまく行なわれるように見えるだろう．この種の方法がいくつか提案されている．しかし，基本的にみな同じところでつまづいているので，ナイーブな提案を見たとしても，特に害悪を感じるということもない．つまり，

$$\langle p^5 x^3 \rangle_S \tag{8-18}$$

を見て，これが，古典力学からただ1つ得られるものなのかどうか考えてみよう．実際，これが単一解ではなく，すでに

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\langle p(t+\varepsilon)x(t)\rangle_S \neq \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\langle x(t+\varepsilon)p(t)\rangle_S \tag{8-19}$$

という例を知っている．それどころか，(8-18)式の運動量ですら，みな同じ時間にとれないことを(8-16)式の例が示している．したがって，pとxの時間順序のとり方が全体の演算子を決める．つまり，異なった時間順序は，異なった演算子を生みだす．27章と29章のノートに，経路積分によって演算子積の順序の問題を扱った論文の文献を載せておいた．

9章　ブラウン運動とウイーナー積分；Kacによる証明

経路積分とブラウン(Brown)運動の関係はあまりに近く，ほとんど区別がつかないといってよい．しかし，不幸なことに，物体と鏡に写ったのその像の関係のように，ブラウン運動は実体にともなう理論であるが，経路積分によるその像はといえば，見る人間側の目のなかにだけ存在するといってよい．

初等的な方法で，ブラウン運動の復習をさっと済ませよう．そのあと，経路空間の上できちんと定義されたウイーナー(Wiener)積分に進む．そのボーナスとして，最近の数学的興味の1つである，確率論とポテンシャル論の関係に少し知見を得ることになる．

直線上の離散的ブラウン運動を考えよう．ここで，すべてのステップは同じ長さΔと，同じ時間間隔εで起き，右へ進む確率がp，左へ進む確率がqとする．つまり，$p+q=1$．$x=j\Delta$および，$t=N\varepsilon$とせよ．$u(j, N)$を時刻0，位置0で出発した点が，時刻$t(N)$で，位置$x(j)$に到着する確率としよう．ブラウン運動の普通の取り扱いは，つぎのようなものである：右に正味jステップ分進むのに，右へμステップ，左へνステップかかったとすれば

$$\mu-\nu=j$$
$$\mu+\nu=N \tag{9-1}$$

この組みあわせは，$\binom{N}{\mu}$通りあるから，偶数の$N-j$では，

$$u(j, N)=\binom{N}{\mu}p^{\mu}q^{\nu} \tag{9-2}$$

奇数の$N-j$では，uはゼロである．スターリング(Stirling)の近似

$$n!=\int_0^{\infty}e^{-t}t^n\,dt\sim\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n \tag{9-3}$$

を使うと，すぐ

$$u(j, N)=\sqrt{\frac{2}{\pi N}}\ \exp\left[-\frac{(j-\alpha)^2}{2N}\right] \tag{9-4}$$

が計算できる．ここで，$\alpha=N(p-q)$であり，jとNは大きな値と仮定した．つぎに，点xでの単位間隔当たりの粒子の密度$\rho(x, t)$を考えよう．これは，ちょうど，$u(j, N)/2\Delta$のはず．（2は，奇の$N-j$に対して$u(j, N)$がゼロになることからくる．）(9-4)式は，xとtを使って

$$\rho(x,t)=\sqrt{\frac{\varepsilon}{2\pi t\Delta^2}}\ \exp\left[-\frac{1}{2t}\left(\frac{\varepsilon}{\Delta^2}\right)(x-\alpha\Delta)^2\right] \tag{9-5}$$

と書くことができる．われわれは，（現実の物理に近づけた理想化としての）連続時間のブラウン運動を考えたい．そこで，xとtを有限に保ったまま，$\Delta\to0$と$\varepsilon\to0$とする．ρが有限かつ自明でないようにこれを行なう方法は，ただ1つ，ε/Δ^2を有限に保つことである．そこで，拡散係数Dを

$$D=\frac{\Delta^2}{2\varepsilon} \tag{9-6}$$

と定義し，これを定数に保つ．さらに，

$$\alpha\Delta=t\frac{\Delta}{\varepsilon}(p-q) \tag{9-7}$$

がなりたつから，有限の結果を得るためには，差$p-q$がゼロにいかなければならない．

$$c=\frac{\Delta}{\varepsilon}(p-q) \tag{9-8}$$

を定義すれば，最終結果は

$$\rho(x,t)=\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}\ \exp\left[-\frac{(x-ct)^2}{4Dt}\right] \tag{9-9}$$

となる．こうして，粒子は，平均位置がドリフト速度cで移動する拡散を行なっている．また，簡単に示されるように，ρは偏微分方程式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=D\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2}-c\frac{\partial\rho}{\partial x} \tag{9-10}$$

満たす．先へ進む前に，ドリフト速度を落とし（すなわち，$c=0$），密度として

$$\rho(x,t)=\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}\ \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \tag{9-11}$$

を使う．

つぎに，Wienerが発展させたブラウン運動への経路和の方法を説明しよう．時刻

$t=0$で$x=0$を出発した粒子が，時刻tに位置がaとbの間にくる確率は，

$$\int_a^b \rho(x,t)\,dx \tag{9-12}$$

である．同様に，$(0,0)$から出発した粒子が時刻t_1にa_1とb_1の間に，t_2にa_2とb_2の間に，……，t_Nにa_Nとb_Nの間にくる確率は（ただし，$(a_i<b_i,\ t_i<t_{i+1})$）

$$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \cdots \int_{a_N}^{b_N} dx_N\,\rho(x_1,t_1)\rho(x_2-x_1,t_2-t_1)\cdots\rho(x_N-x_{N-1},t_N-t_{N-1}) \tag{9-13}$$

で与えられる．変数x_i-x_{i-1}やt_i-t_{i-1}が現われるのは，もちろんこの拡散過程が空間と時間で一様であることを反映しているからである．

ここで，数学屋さんたちとはお別れして，最後の変数x_Nに関する積分を落としてしまう．われわれにとって知りたい量は，粒子が，$(0,0)$から出発して，$(x,t)[\equiv(x_N,t_N)]$に到着するものとして，時刻t_i，$i=1,\ldots,N-1$に$a_i<x(t_i)<b_i$に見いだされる条件つき確率である．この確率（密度）は基本的には(9-13)式で与えられるが，ここでは，x_Nについては積分しないで，かつ$\rho(x_N,t_N)$で割らなければならない．（事象Aが事象Bの下で起きる条件つき確率$P(A|B)$は，$P(A|B)=P(A \text{ and } B)/P(B)$

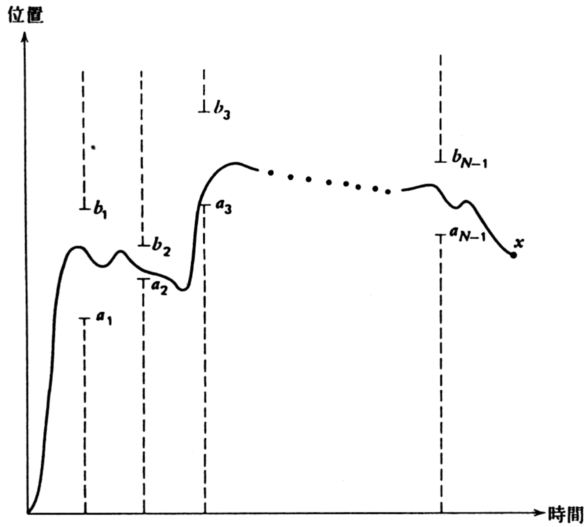


図9-1 条件$x(0)=0$，$a_i<x(t_i)<b_i\ (i=1,\ldots,N-1)$，$x(t)=x$を満たす軌跡

で与えられることを思いだせ．Gel'fandとYaglomの論文には，数学的にもっと一般的な対象，すなわち，最終位置を固定しないものが載っている．）図9-1に，上の状況を説明しておいた．(9-13)式の積分（$\int dx_N$を除く）は，粒子の経路が，それぞれの時刻にそれぞれの通過口を通り抜けていく確率を表わす．

通過する区間(a, b)を指定する時刻の数をふやしながら，$|b-a|\to 0$の極限をとれば，粒子の経路をより精密に特定できるだろうと想像される．もちろん，この直感があてはまるためには，連続的な軌跡に限定することが重要である．こうやって，$N\to\infty$の極限で，経路空間上の測度が得られる．これを，ウイーナー(Wiener)測度といい，この測度を用いてウイーナー積分が定義される．

(9-13)式および図9-1を，通常の測度理論に関係づけるために，つぎの点を明確にしておく必要がある：(1)どの空間で測度を定義するか．(2)可測な集合のσ-代数は何か．[R上のルベーグ測度については，これらは，複数の区間(c, d)の可算個の合併集合と有限個の共通部分であることを思いだせ]．(3)そのσ-代数で，1つの集合の測度とはなにか．[R上のルベーグ測度では，$d>c$として$\mu_2((c, d))=d-c$]．われわれが課したい測度をもつ空間は，連続関数$x(\cdot)$の空間である．ただし$x(0)=0$．さらに，$x(t)$は，任意であるか，$x(t)=x$かのいずれかである．後者の場合には，条件つきのウイーナー測度を構成する．σ-代数は，つぎに定義される「柱状集合」

$$K[a_1, b_1, t_1; a_2, b_2, t_2; \cdots; a_n, b_n, t_n]$$

$$=\{x(\cdot)|a_i<x(t_i)<b_i,\quad i=1,\dots,N\}$$

からつくられる．このような集合の測度は，(9-13)式に現われる数そのものである．(条件つきの測度の場合には，

$$\frac{\int_{a_1}^{b_1}dx_1\cdots\int_{a_{N-1}}^{b_{N-1}}dx_{N-1}\rho(x_1, t_1)\cdots\rho(x_N-x_{N-1}, t_N-t_{N-1})}{\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dx_{N-1}\rho(x_1, t_1)\cdots\rho(x_N-x_{N-1}, t_N-t_{N-1})} \tag{9-13a}$$

を使い，柱状集合の定義もそれにあわせて変形しておく．）σ-代数を得るには，まず複数の柱状集合の可算個の合併集合と共通部分をつくりだし，測度を通常の測度論にしたがって定義すればよい．一般的な測度論の定理を使って，われわれがウイーナー測度とよんでいる結果が，実際，測度になっていることを証明することができる．われわれの計算に重大な関係をもつのは，つぎの事実である：（ウイーナー測度の意味で）ほとんどすべての連続関数は，いたるところ，微分不可能である．

ウイーナー積分を，経路積分でやっているように，$\int dx(\tau)$と書いてもよい．ある

いは，$\int d\mu(x(\tau))$ のほうが好きな人もいるかもしれない．実際，われわれは確率論的な立場をとって，この積分を期待値Eとみなす．たとえば，Qを経路$x(\tau)$のある関数とする．このとき，

$$E_{xt}(Q)=\sum_q qP'_w\{x(\tau)\in\Omega|Q[x(\tau)]=q\} \tag{9-14}$$

と書く．ここでΩは，(0, 0)から(x, t)へいたる経路からなる空間．$P'_w\{x\in\Omega|Q(x)=q\}$は，$Q$が$q$という値をとる経路の集合の，規格化されていないウイーナー測度［すなわち，(9-13a)式の分子だけを使った］．Eについた下つきの文字xとtは，規格化されていない条件つき期待値をとったということを意味するものとする．実際問題としては，(9-14)式はファインマン積分と同じ方法で計算する．(0, 0)から始まって，(x_1, t_1)，……，(x_{N-1}, t_{N-1})と行き，(x, t)で終る折れ線の経路の上で，Qが$Q(x_1, \ldots, x_{N-1})$の値をとるとする．ただし，$t_j=jt/N$．すると，

$$E_{xt}(Q)=\lim_{N\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}dx_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dx_{N-1}\rho(x_1,t_1)\rho(x_2-x_1,t_2-t_1)\cdots \times\rho(x-x_{N-1},t-t_{N-1})Q(x_1,\ldots,x_{N-1}) \tag{9-15}$$

である．E_{xt}が規格化されていないのは，(9-15)式にx_Nの積分が含まれていないことからきている．この状況は，次式

$$E_{xt}(1)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \tag{9-16}$$

で正確に表わされている．規格化の補正は簡単にできる．しかし，ここではもう少しE_{xt}にこだわってよう．

$U(x)$をxのある関数だとしよう．4章で見たように，経路積分型のプロパゲータがシュレーディンガー方程式を満たすことはFeynmanが証明した．今度は，量

$$W(x,t)\equiv E_{xt}\left[\exp\left(-\int_0^t U(x(\tau))\,d\tau\right)\right] \tag{9-17}$$

に対して，同じようなことをKacが証明しているので，それを見よう．期待値の基本的な性質は，線形性である．よって，

$$W(x,t)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j}{j!}E_{xt}\left[\left(\int_0^t U(x(\tau))\,d\tau\right)^j\right] \tag{9-18}$$

Kacは，この操作の数学的な正当性を保証するために，最初はあえて有界な関数Uに限定した．われわれは，そこまで注意深くはできないが，興味ある読者は，彼の本を見ていただきたい．厳密な証明が載っている．

jについての和に現われる諸々の項を考えよう．$j=0$に対しては，

$$E_{xt}(1)=\frac{e^{-x^2/4Dt}}{\sqrt{4\pi Dt}}\equiv W_0(x,t)\qquad(=\rho(x,t))\tag{9-19}$$

がなりたつ．この式は，W_0の定義にもなっている．$j=1$では，

$$W_1(x,t)\equiv E_{xt}\left[\int_0^t U(x(\tau))\,d\tau\right]=\int_0^t E_{xt}[U(x(\tau))]\,d\tau\tag{9-20}$$

を考えなければならない．$U(x(\tau))$の期待値は，$x(\tau)$が値ξをとり，そこで$U(\xi)$をかけ，それをξの上で和をとることによって得られる確率である．よって，

$$\begin{aligned}W_1(x,t)&=\int_0^t d\tau\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\,\rho(x-\xi,t-\tau)U(\xi)\rho(\xi,\tau)\\&=\int_0^t d\tau\int d\xi\,\rho(x-\xi,t-\tau)U(\xi)W_0(\xi,\tau)\end{aligned}\tag{9-21}$$

と書くことができる．$j=2$には，2個の積分が関与するので，

$$W_2(x,t)\equiv\tfrac{1}{2}E_{xt}\left[\int_0^t U(x(\tau_1))\,d\tau_1\int_0^t U(x(\tau_2))\,d\tau_2\right]\tag{9-22}$$

と定義すると便利である．

つぎに，これから使うよく知られた公式を説明する．

補題

$$\left[\int_0^t f(\tau)\,d\tau\right]^N=N!\int_0^t d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2\cdots\int_0^{\tau_{N-1}}d\tau_N f(\tau_1)f(\tau_2)\cdots f(\tau_N)\tag{9-23}$$

証明は，Nについての帰納法による．$N=1$のとき，(9-23)式は自明．つぎに

$$g_N(t)=\left[\int_0^t f(\tau)\,d\tau\right]^N\tag{9-24}$$

とする．これは，すべてのsについて$dg_N(s)/ds=Ng_{N-1}(s)f(s)$を満たす．$s$が0から$t$まで積分される際に，$(N-1)$に対して，帰納法の仮定が正しいとすると，(9-23)

式がでる．

(9-22)式は，こうして

$$W_2(x,t)=\int_0^t d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2 E_{xt}\left[U(x(\tau_1))U(x(\tau_2))\right] \tag{9-25}$$

となる．$\tau_1 \geqq \tau_2$ということと，(9-21)式にいたるまでの論理に注意すると，

$$\begin{aligned}W_2(x,t)&=\int_0^t d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2\int\int d\xi\, d\eta\,\rho(x-\xi,t-\tau_1)U(\xi)\rho(\xi-\eta,\tau_1-\tau_2)\\&\quad\times U(\eta)\rho(\eta,\tau_2)\\&=\int_0^t d\tau_1\int d\xi\,\rho(x-\xi,t-\tau_1)U(\xi)W_1(\xi,\tau_1)\end{aligned} \tag{9-26}$$

を得る．もし

$$W_j(x,t)\equiv\frac{1}{j!}E_{xt}\left[\left(\int_0^t U(x(\tau))\,d\tau\right)^j\right] \tag{9-27}$$

とすると，

$$W_j(x,t)=\int_0^t d\tau\int d\xi\,\rho(x-\xi,t-\tau)U(\xi)W_{j-1}(\xi,\tau) \qquad j=1,2,\ldots \tag{9-28}$$

となることはもう明らかである．(9-17)式に戻って，Wは

$$\begin{aligned}W(x,t)&=\sum_{j=0}^{\infty}(-1)^j W_j(x,t)\\&=W_0(x,t)-\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^{j-1}\int_0^t d\tau\int d\xi\, W_0(x-\xi,t-\tau)U(\xi)W_{j-1}(\xi,\tau)\\&=W_0(x,t)-\int_0^t d\tau\int d\xi\, W_0(x-\xi,t-\tau)U(\xi)W(\xi,\tau)\end{aligned} \tag{9-29}$$

と書くことができる．方程式$(\partial/\partial t-D\partial^2/\partial x^2)W_0=0$，および$t\downarrow 0$では$W_0(x,t)$がデルタ関数であることを思いだすと，$W$のためのこの積分方程式は，$W$の微分方程式

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t}=D\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2}-U(x)W(x,t) \tag{9-30}$$

を暗に意味していることがわかる．つまり，ここに経路積分とウイーナー積分の理論上の平行関係が，(9-30)式を通して，大きく前面に現われた．(9-29)式は，時間

依存の摂動論からでてくるなじみの式と同じものだとみなすこともできる．また，$t \to -it$ とすれば，リップマン - シュヴィンガー (Lippman-Schwinger) 方程式のフーリエ変換ともみなせる．

この章に出てきた関係式によって，確率論とポテンシャル理論のつながりを確立することができる．例として，1次元の中でブラウン運動をしている（ドリフトがないとする）質点を考える．$t=0$ で $x=0$ を出発したとして，最初に点 $x=+a$ を通過する時間を知りたいとしよう．いいかえれば，運動軌跡 $x(\tau)$ が，$0 \leqslant \tau \leqslant t$ にあるすべての τ に対して，$x(\tau) \leqslant a$ を満たす確率を計算したい，ということにもなる．この確率を $p(t)$ としよう．

この問題では，条件つきではないウイーナー測度，つまり，E_{xt} で変数 x について積分することによって得られる測度を使ったほうが簡単である．この積分（E_t とする）は，(0, 0) から出発して，時刻 t でどこかに到達する経路についての和に等しい．したがって，

$$E_t(Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, E_{xt}(Q) \tag{9-31}$$

である．(9-16) 式から，E_t が $E_t(1)=1$ となるように正しく規格化できるのは明らか．そこで，

$$Q(x(\tau)) = \exp\left(-\int_0^t V_a(x(\tau))\, d\tau\right) \quad ただし \quad V_a(x) = \begin{cases} 0 & x<a \\ +\infty & x>a \end{cases} \tag{9-32}$$

を定義しよう．汎関数 Q は，経路が点 $x=a$ の右側へいってしまうとゼロになり，それ以外では1の値をとる．したがって，$p(t)$，つまり粒子が決して点 a の右側へいってしまわない確率は，単純に

$$p(t) = E_t(Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, E_{xt}\left[\exp\left(-\int_0^t V_a(x(\tau))\, d\tau\right)\right] \tag{9-33}$$

と書くことができる．しかし一方で，われわれは，期待値

$$E_{xt}\left(\exp\left(-\int V_a\, d\tau\right)\right) \equiv W(x, t) \tag{9-34}$$

が，(9-30) 式において $U=V_a$ と置きかえた方程式を満たすことを知っている．ポテンシャル V_a のシュレーディンガー方程式に対するグリーン関数は

$$i\frac{\partial G(x,s;0)}{\partial s}=-D\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}+V_a G \tag{9-35}$$

を満たす（ただし，($\hbar=1$)）．G も W も $t\to 0$ の極限でデルタ関数に近づく．(9-35)式を(9-30)式とくらべると，

$$G(x,-it;0)=W(x,t) \tag{9-36}$$

がわかる．

G を計算するには，固有関数で展開すればよい．しかし，経路積分や鏡像法を使って，よりはっきりした結果をだすことができる．経路積分で経験したことから，つぎのようにすればよいことが示唆される．つまり，$x<a$ ではゼロ，点(a)では無限に高い壁をもつポテンシャルの中で，(0, 0)を出て(x, t)にいたる古典経路をさがせばよい．そういう経路は2つある．1つは，(a)速度(x/t)で直接いくもの．もう1つ(b)は，壁で跳ね返されてから到達するもので，その速度は$(2a-x)/t$．それぞれの作用積分は（粒子の有効質量を$1/2D$として），

$$S_a=\frac{x^2}{4Dt},\qquad S_b=\frac{(2a-x)^2}{4Dt} \tag{9-37}$$

である．もしWKB近似が厳密解を与えるものとすると，G に対する合理的な推定は

$$G(x,t;0)=\sqrt{\frac{1}{4\pi Dit}}\left[\exp\left(\frac{ix^2}{4Dt}\right)-\exp\left(i\frac{(2a-x)^2}{4Dt}\right)\right] \tag{9-38}$$

のようなものであろう．ただし，$x>a$ で G はゼロ．いまのところ，(9-38)式で意味がはっきりしていないのは，指数関数の中の第2項についた負号だけである．この負号がつく理由は，点 $x=a$ にある無限の壁で波動関数（ここではグリーン関数）がゼロにならなければならないこと，すなわち，$G(a,t;0)=0$ でのディリクレ境界条件による．この負号のおかげで $G(a,t;0)=0$ となることはすぐわかる．つぎに，(9-38)式の G が，実際，厳密解であることをいいたい．この各項は，(9-35)式を個別に満たす．さらに，a での境界条件も満たす．最後に，$t\to 0$ で，第1項はデルタ関数となり，第2項は落ちる（$x=2a$ は不可能だから）．(9-38)式は，本質的に鏡像法の応用である．

(9-36)式を使い(9-38)式を(9-33)式に代入すると，最終的に

$$p(t)=\int_{-\infty}^{a}dx\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}\left[\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)-\exp\left(-\frac{(2a-x)^2}{4Dt}\right)\right]$$
$$=2\sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}}\int_0^a \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)dx \qquad (9\text{-}39)$$

が得られる．

ここで使った方法を一般化して，経路の到達点がもっといろいろな領域に変わっても，対処可能なようにできる．

経路積分とウイーナー積分の比較の問題に戻って，つぎの問題を考える．すでに指摘されているように，ウイーナー積分は経路からなる空間できちんとした測度をもつが，このことを利用して，ファインマン経路積分に本当の意味での積分をもたらすようにできないだろうか．経路積分を，トロッター公式を使って導いたもの以上にすることができるだろうか．

はじめに，どうやったらウイーナー積分からファインマン積分に移行できるか，その可能性を考えてみよう．上に出てきたUを純虚数とし，$U(x)=iV(x)$と書く．これ自体は，なんでもない．つぎに，$W(x, t)$を拡散係数Dの関数とみなし，そのDが複素数でもよいようにする．実かつ正のDなら，ウイーナー積分は完全に明確な量である．特に，

$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}e^{-x^2/4Dt}$$

に現われる適当なDを使って，(9-15)式のように期待値が計算できる．さて，Dを複素数にする．ウイーナー積分を解析接続することで，かなりのことが得られる．特に，解析接続されたものは，シュレーディンガー方程式を満たす．しかし，不幸なことに，ひとたびDが実数でなくなると，解析接続されたものも，汎関数積分ではなくなるのだ．

近年，経路積分を完璧にするために，より一般的な，あるいは，より弱い種類の測度（すなわち複素のD）を発展させる研究が行なわれてきている．C.DeWitt-Moretteは，経路の和としての経路積分のすぐれた描像を保ったまま，数学的な正当性を保証するために，種々の“擬測度”を調べている．S.AlbeverioとR.Hoegh-KrohnおよびA.Trumanは，経路積分の厳密な方法論を与えた．特に，A.Trumanは，経路からなるヒルベルト空間というものを定義した．そこでは，ある意味で多角形の経路が考えられ，Feynmanの経路積分に対する基本的な概念にしたがって，

和がとられる．本書の目的からははずれるので，この詳細には立ちいらない．しかし，もし読者が，本書がとっているバランス感覚，すなわち，それほど堅固でもない理論からしっかりした結論を引きだそうとするやり方に居心地の悪さを感じたら，これらの問題をもっと追究したいタイプの人なのだと思う．参考文献を下に載せておくので，研究して欲しい．

演習：　拡散係数Dをもって，1次元のブラウン運動をしている粒子が，時刻$t=0$で，区間[0, 1]にいるとする．この粒子はそのときに，どのほかの区間に移動することも同様に可能であるとする．この区間から最初に抜けだすのに，平均してどのくらい時間がかかるか．

ノート

本章の多くの話題は，

M. Kac, *Probability and Related Topics in the Physical Sciences*, Interscience, New York, 1959

から採った．確率論とポテンシャル論の間の関係については，

R. Hersh and R. J. Griego, "Brownian Motion and Potential Theory,"*Sci. Amer.* **220**, No.3, 67 (March 1967)

が有名である．本章のトピックスについての一般的かつ重要な参考文献として，

I. M. Gel'fand and A. M. Yaglom, *J. Math. Phys.* **1**, 48 (1960)

がある．ウイーナー積分をファインマン積分に解析接続したのは，Nelsonで

E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5**, 332 (1964)

である．解析接続したものが，汎関数積分になってはいないという事実は，

R. H. Cameron, *J. Math. and Phys.***39**, 126 (1960)

にある．擬測度やそれに関連した問題は，

C. Morette DeWitt, *Commun. Math. Phys.* **28**, 47 (1972)

C. Dewitt-Morette, *Commun. Math. Phys.* **37**, 63 (1974)

を見るとよい．経路積分に対する厳密なアプローチとしては，

L. L. Lee, Continuum Calculus and Feynman's Path Integrals, *J. Math. Phys.* **17**, 1988 (1976)

S. A. Albeverio and R. J. Hoegh-Krohn, *Mathematical Theory of Feynman Path Integrals*, Lecture Notes in Mathematics No.523, Springer Verlag, Berlin, 1976

A. Truman, The Feynman Maps and the Wiener Integrals, *J. Math. Phys.* **19**, 1742 (1978)

がある．Trumanの論文では，特に，Feynmanの多角形の経路の描像を残すことに関心がはらわれている．

10章　摂動論とファインマンダイアグラム

ファインマンダイアグラムは，摂動論を表現するのに図形的，直観的で，かつ役に立つ方法を与える．Kacは条件つき期待値が拡散方程式を満たすことを証明したが，その際に使われた技法とよく似た技法を使って経路積分を表わそうとすると，このダイアグラムが自然に現われてくる．

ファインマンダイアグラムを得るのに必要な数学は，前章で使ったものとほとんど同じである．ただ，ウイーナー測度という実体ではなく，経路積分というイメージを扱うという点で異なる．(9-17)式と(9-18)式でやったように，グリーン関数を展開する，つまり，

$$G(x,t;y,0)=\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(x)\right)d\tau\right]$$
$$=\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{m\dot{x}^2}{2}\right]\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^j\left(\int_0^t V(x(\tau))\,d\tau\right)^j \tag{10-1}$$

この式で，$\exp[i\int_0^t(m\dot{x}^2/2\hbar)d\tau]$は，被積分関数の一部としてでてきている．9章の表記法（数学では普通の表記法だが）では，因子$\rho(x,\ t)=(4\pi Dt)^{-1/2}\exp(-x^2/4Dt)$は，測度のなかに吸収されていて，期待値を書くときには表に現われなかった．

(10-1)式の展開の最初の項($j=0$)は，

$$G_0(x,t;y,0)\equiv\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{m\dot{x}^2}{2}d\tau\right]$$
$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\ \exp\left[\frac{im}{2\hbar t}(x-y)^2\right] \tag{10-2}$$

であるが，これは自由粒子のプロパゲータである．$j=1$の項は，つぎの式

$$G_1(x,t;y,0)\equiv\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_0^t\dot{x}^2\,d\tau\right]\int_0^t V(x(\tau))\,d\tau \tag{10-3}$$

を含む．Kacの証明でやったように積分順序を変更して，τ 積分に先立って経路積分のほうを実行する．Kacの証明では，この段階で(9-21)式を得るために確率論的な議論を行なったが，ここでは，少し違う論理を使う．われわれは，経路積分が多重積分の極限として定義されていることに注目する．τ（(10-3)式で，積分順序が変更された後の仮の変数）を t_j とせよ．また，$x(\tau)$ を x_j とする．こうすると，

$$G_1(x,t;y,0)=\sum_j(\Delta t)\int\prod_{i=1}^N dx_i\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\,\Delta t}\right)^{(N+1)/2}$$

$$\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar\,\Delta t}\sum_{k=0}^N(x_{k+1}-x_k)^2\right]V(x_j) \qquad (10\text{-}4)$$

となる．$k=1, \ldots, j-1$ と $k=j+1, \ldots, N'$ の積分は，自由粒子の積分にほかならない．いま，x_j を ξ とよべば，9章のように，

$$G_1(x,t;y,0)=\int_0^t d\tau\int d\xi\, G_0(x-\xi,t-\tau)V(\xi)G_0(\xi-y,\tau) \qquad (10\text{-}5)$$

と書くことができる．そこで，

$$G_k(x,t;y,0)\equiv\frac{1}{k!}\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_0^t\dot{x}^2\,d\tau\right]\left[\int_0^t V(x(\tau))\,d\tau\right]^k \qquad (10\text{-}6)$$

を定義する．すると，ふたたび9章でやったように，

$$G_k(x,t;y,0)=\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_0^t\dot{x}^2\,d\tau\right]$$

$$\times\int_0^t d\tau_1\int_0^{\tau_1}d\tau_2\cdots\int_0^{\tau_{k-1}}d\tau_k V(x(\tau_1))\cdots V(x(\tau_k))$$

$$=\int_0^t d\tau\int d\xi\, G_0(x,t;\xi,\tau)V(\xi)G_{k-1}(\xi,\tau;y,0) \qquad (10\text{-}7)$$

が導かれる．前と同様に，ただちに，

$$G(x,t;y,0)=G_0(x,t;y,0)-\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\int d\xi\, G_0(x,t;\xi,\tau)V(\xi)G(\xi,\tau;y,0)$$
$$(10\text{-}8)$$

が成立するが，これは時間依存の摂動論の定式化である［ついでながら，ここでの

導出では，Vが時間依存性をあらわにもっていても構わなかった．その場合には，$V(\xi, \tau)$が(10-8)式に現われる]．しかし，いまは，展開

$$G(x, t; y, 0) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^j G_j(x, t; y, 0) \tag{10-9}$$

の各項を吟味し，その解釈を行なう．まず，(10-9)式の和の各項を$(y, 0)$から(x, t)へいたるそれぞれの経路の確率振幅だと考える．$G(x, t; y, 0)$自体が全体の振幅を与えているわけだ．$G_0(x, t; y, 0)$は，$(y, 0)$から(x, t)へ行くための振幅だから，粒子がポテンシャルVにまったく影響されずに旅程を完結する確率振幅だと解釈できる．(10-5)式のG_1は，τとξの上での積分だから，いろいろな旅程をもつ運動の確率振幅の和と考えられる．つまり，[(10-5)式を見よ] 粒子は，(ξ, τ)へ振幅$G_0(\xi, \tau, y, 0)$をもって自由に伝播し，そこでポテンシャル$V(\xi)$とぶつかり，最後は，(ξ, τ)から(x, t)へと自由に運動する．この振幅をすべての可能な位置ξと時間τについて足しあわせる．Feynmanのビッグヒットの1つは，この一連の事象を図で表現したことである．図10-1のダイアグラムでは，時間は上向き方向に進み，太い線分は自由プロパゲーションを表わす．記号“V”から出て自由プロパゲーションの線分の端点（この点をバーテックス(vertex)という）に届く波線は，ポテンシャルとの相互作用を表わす．場の理論の摂動論では，実際，ほかの別の粒子，たとえば光子，の自由プロパゲーションに対応する．項$G_2(x, t; y, 0)$は，同様に，2つの自由プロパゲーションと，2回のポテンシャルとの相互作用がでてくるようにダイアグラムを伸ばして書けばよい．G_2のファインマンダイアグラムは図10-2に与えられてい

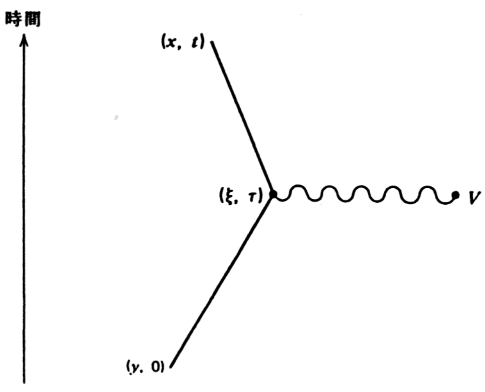


図10-1　1次摂動論に対するファインマンダイアグラム

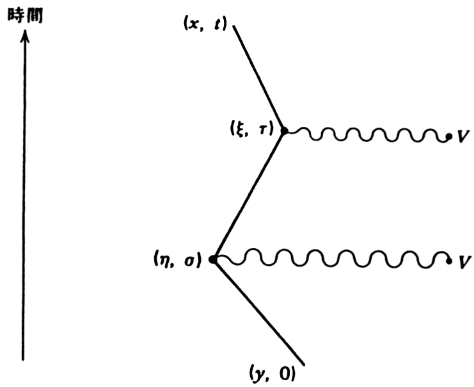


図10-2　2次摂動論のためのファインマンダイアグラム

る．ここでも，η, σ, ξおよびτについて，相互作用が起きうるすべての可能な位置と時間についての積分が出てくる．高次のG_j, $j=3, 4, \ldots$がダイアグラムでどのように表現されるかは，もう明らかであろう．

(10-1)式以外の摂動展開にも簡単に実行できる．特に，Vを$(V-U)+U$のように書くと，(10-1)式の展開は

$$G(x,t;y,0)=\int dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}-U(x(\tau))\right)d\tau\right]\times\sum_{j=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^j\frac{1}{j!}\left[\int_0^t(V-U)\,d\tau\right]^j \tag{10-10}$$

の形をとる．前にやったことが，まったく同じようにいくが，G_0は今度は

$$G_0(x,t;y,0)\equiv\int_{y,0}^{x,t}dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2-U(x(\tau))\right)d\tau\right] \tag{10-11}$$

と定義されているだけである．もちろん，(10-2)式のようには，あらわに評価はできないかもしれない．(10-8)式では，Vは$(V-U)$で置きかわるし，それに応じてファインマンダイアグラムも変更される．

第2部　　応　用　編

11章　漸近解析

ここからつぎの2，3章は，WKB近似を深く調べることにあてる．これをしっかり実行するために，はじめに漸近近似を復習する（3章でも少しふれた）．また，古典力学の最近の話題と，物理屋にはあまりなじのない変分論にふれる．

最初に，漸近理論の用語を準備しておこう．ある有限または無限の数cに対して$x \to c$とするときの，2つの関数$f(x)$と$g(x)$の極限値を考えよう．小文字のo記号を次のように定義する：$x \to c$のときに，もし，$f(x)/g(x) \to 0$ならば

$$f(x)=\mathrm{o}(g(x)) \qquad (x \to c) \tag{11-1}$$

と書く．一方，大文字のO記号は，fが相対的に大きな値をとることを許す．つまり，$x \to c$の極限で$|f(x)/g(x)|$が有界のとき，

$$f(x)=\mathrm{O}(g(x)) \qquad (x \to c) \tag{11-2}$$

と書く．$|f(x)/g(x)|$が$[a, c)$で有界のとき，$f=\mathrm{O}(g)$, $x \in [a, c)$と書く．その場合には，上から抑える値$M\,(=\sup|f/g|)$が存在して

$$|f(x)| \leq M|g(x)| \qquad x \in [a, c) \tag{11-3}$$

とできる．(11-1)式と(11-2)式の等号は，それぞれの定義式で与えられた特有の意味で規定されており，普通の等号とは異なる．たとえば，$\mathrm{o}(\varphi)+\mathrm{o}(\varphi)=\mathrm{o}(\varphi)$や$\mathrm{o}(\varphi)=\mathrm{O}(\varphi)$はなりたつが，$\mathrm{O}(\varphi)=\mathrm{o}(\varphi)$はなりたたない．

漸近級数の概念はもともとPoincaré（ポアンカレ）に始まるが，ここでは，やや限定された定義を与える：　級数

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \tag{11-4$'$}$$

は，もし，それぞれのNに対して，

$$\left|f(x)-\sum_{j=0}^{N} a_j x^j\right|=\mathrm{o}(x^N) \tag{11-5}$$

がなりたつなら，関数$f(x)$の$x \to 0$の極限における漸近級数という．このとき

$$f(x) \backsim \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \tag{11-6}$$

と書く．

より一般的には，漸近級数は，あるcに対して$\phi_{n+1}(x)=\mathrm{o}(\phi_n(x))$，$x \to c$となるような関数列$\phi_n(x)$について定義できる．

漸近級数と収束級数は，基本的に違う．(11-4)式のような級数にとって収束とは，与えられたεとxに対して，$M>N$を満たすようなすべてのMについて$|f(x)-\sum_{n=0}^{M} a_n x^n|$が成立するような$N$が存在することである．一方，漸近級数の場合，与えられる量は，εとNである．このときに級数が漸近的とは，$x<\xi$の範囲で$|f(x)-\sum_{n=0}^{N} a_n x^n|<\varepsilon x^N$を満たすことができるような$\xi$が存在するということである．

非収束の漸近級数を使って，この点を見てみよう．つぎの

$$F(t)=\int_0^{\infty} dx \exp(-x^2-tx^4) \tag{11-7}$$

を例にとる．はじめに，この関数は，積分表示を

$$U(a,z)=\frac{\exp\left(-\frac{1}{4}z^2\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+a\right)}\int_0^{\infty} e^{-sz-(1/2)s^2} s^{a-1/2}\, ds \tag{11-8}$$

にもつ放物型円柱関数と関連している．実際，変数変換で

$$F(t)=\frac{\sqrt{\pi}\exp(1/8t)}{2(2t)^{1/4}}\,U\left(0,\frac{1}{\sqrt{2t}}\right) \tag{11-9}$$

となることがわかる．

$t \to 0$の極限で$F(t)$を考えよう．(11-7)式で，tを含んでいる指数関数を展開し，積分と和の順序を入れかえる，

$$F(t) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!}\int_0^{\infty} e^{-x^2} x^{4n}\, dx \tag{11-10}$$

ガンマ関数が，

$$\Gamma(z)=\int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1}\, dt \tag{11-11}$$

だから，

$$\int_0^\infty e^{-x^2}x^{4n}\,dx=\tfrac{1}{2}\Gamma\left(2n+\tfrac{1}{2}\right)=\frac{(4n-1)!\sqrt{\pi}}{(2n-1)!2^{4n}} \tag{11-12}$$

を得る．こうして，

$$F(t)\sim\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2}\frac{1}{n!}\Gamma\left(2n+\tfrac{1}{2}\right)(-t)^n \tag{11-13}$$

となる．ここで，$\Gamma(2n+(1/2))$ がほぼ$(2n)!$だから，$n!$で割ってもまだ，$2^n n!$のオーダーの項が残る．したがって，(11-13) 式の級数の収束半径は，ゼロであり，実際，式 (11-10) 式，(11-13) 式では等号を使うのをやめている．部分和の誤差評価を含めて，この級数が漸近級数であることの証明はしない．そのかわり，この級数は発散するにもかかわらず，計算の道具として役に立つことを示そう．(11-13) 式のはじめの数項は

$$F(t)=\sqrt{\pi}\left[\frac{1}{2}-\frac{3t}{8}+\frac{105}{32}t^2-\frac{10395}{128}t^3+\cdots\right] \tag{11-14}$$

で，すでに，$t=1/50$ に対してよい近似になっている（5桁の表を見ると，$U/\sqrt{\pi}=0.49307$ だから，5桁目で不一致があるだけ）．
（ついでながら，いまと逆の方向にたどると，ボレル(Borel)総和法の一例になっている．）

もっと簡単な例として，

$$G(t)=\int_0^\infty\frac{e^{-xt}}{1+x}dx \tag{11-15}$$

を考える．項$(1+x)^{-1}$を$1-x+x^2-\cdots$と展開して，各積分を実行すると

$$G(t)\sim\frac{1}{t}-\frac{1!}{t^2}+\frac{2!}{t^3}-\frac{3!}{t^4}+\cdots \tag{11-16}$$

となる．この級数は明らかに発散する．しかし，$t=10$ の場合に「予測」をしてみると，

$$G(10)=0.1-0.01+0.002-0.0006+\cdots \tag{11-17}$$

となる．第4項までの和は，0.0914．一方，別の方法から分かっている正しい値は，0.09156....だから，この展開はきわめて良好な結果をあたえることがわかる．

演習：　(11-16) 式は，$1/t$で展開すると漸近級数になることを示せ．［(11-15) 式のGのこと］

演習：　誤差関数の定義から $1-\mathrm{erf}(x)=(2/\sqrt{\pi})\int_x^\infty \exp(-t^2)\,dt$．部分積分を使って

$$\int_x^\infty e^{-t^2}\,dt=e^{-x^2}\left[\frac{1}{2x}-\frac{1}{2^2x^3}+\frac{1\cdot 3}{2^3x^5}-\frac{1\cdot 3\cdot 5}{2^4x^7}+\cdots\right]$$

が漸近級数であることを示せ．

要は，項を多くとりすぎなければ，漸近級数は有用な結果を与えることができる，ということである．

漸近級数については，和，積，積分，微分がなりたつ．章末の文献を参照してほしい．

あとの章で関係してくる結果を，最後に1つ．任意の n に対して $x\to 0^+$ のとき，$x^{-n}e^{-1/x}\to 0$ がなりたつから，$e^{-1/x}$ の漸近展開は恒等的にゼロである．

漸近理論の観点から，前にとりあげたラプラスの方法と停留位相の方法（3章を見よ）の結果をふり返ってみよう．積分

$$F(\lambda)=2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\int_0^\infty e^{-\lambda(x^2+f(x))}\,dx \qquad (11\text{-}18)$$

を，$\lambda\to\infty$ の極限で考える．ただし，$f(x)=\mathrm{o}(x^2)$，$f(x)\geqslant 0$．停留点は，$x=0$ であり，ラプラスの方法によって，$F(\lambda)-1=\mathrm{o}(1)$，$(\lambda\to\infty)$ となる．これを調べよう．

$$\begin{aligned}\tfrac{1}{2}(1-F(\lambda))&=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\int_0^\infty dx\,e^{-\lambda x^2}(1-e^{-\lambda f(x)})\\&=\int_0^a+\int_a^\infty\equiv\Delta_1+\Delta_2\end{aligned} \qquad (11\text{-}19)$$

を考える．(11-19) 式の第2項に示されているように，a になにかよい値を選べばうまく評価できる．正の $f(x)$ に対して，

$$0<1-e^{-\lambda f(x)}\leqslant\lambda f(x) \qquad (11\text{-}20)$$

がなりたつ［証明：$\varphi(u)\equiv\exp(-u)-1+u=\int_0^u dx\int_0^x dy\,\exp(-y)$ から $\varphi\geqslant 0$］．これから，

$$\Delta_1\leqslant\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\int_0^a\lambda f(x)e^{-\lambda x^2}\,dx\leqslant\frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\left(\int_0^\infty e^{-\lambda t^2}\,dt\right)\max_{0<x<a}f(x) \qquad (11\text{-}21)$$

$f(x)=\mathrm{o}(x^2)$ より，$\displaystyle\max_{0\leqslant x\leqslant a}f(x)=a^2\eta(a)$ を満たす関数 η が存在する．ただし，$\eta(a)=\mathrm{o}(1)$，

$a \to 0$．Δ_1は，上に有界で

$$\Delta_1 < \lambda a^2 \eta(a) \tag{11-22}$$

Δ_2については，$e^{-\lambda f(x)}$を無視しておおざっぱに評価すると

$$\begin{aligned}\Delta_2 &< \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty \left(\frac{-1}{2\lambda x}\right) \frac{d}{dx} e^{-\lambda x^2} dx \\ &= -\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2\lambda} \frac{\exp(-\lambda x^2)}{x}\bigg|_a^\infty - \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \int_a^\infty e^{-\lambda x^2} \frac{1}{2\lambda x^2} dx \\ &< \frac{e^{-\lambda a^2}}{\sqrt{4\pi\lambda a^2}}\end{aligned} \tag{11-23}$$

がわかる．われわれは，$\lambda \to \infty$のときに$\Delta_1 + \Delta_2 \to 0$となるようにしたい．$\Delta_2$をゼロにするには，明らかに，$a$が$1/\sqrt{\lambda}$よりも少し遅くゼロにいかなければならない．（よって，$\lambda a^2 \to \infty$.）しかし，$\eta(a)\lambda a^2 \to 0$になる程度には速くなければならない．たとえば，$f(x) = x^4$ならば，$\eta(a) = \mathrm{const} \cdot a^2$．明らかに，$a = (\log \lambda)/\sqrt{\lambda}$ととればよい．

ここでした証明は，厳密性に欠けるわけではないが，変数変換

$$y^2 = x^2 + f(x) \tag{11-24}$$

を使って行なう証明にくらべれば，エレガントさにやや欠ける．fの大きさに関する仮定のおかげで，この変換が（ある区間で）十分，数学的に意味のあるものであることが保証される．このきれいな証明のほうが，教科書にはよく使われる．わざわざ上のようなやり方をしたのは，積分領域のどこが積分値を決めるのに重要なのか，を感得するセンスを養うためである．

ノート

以下は，漸近解析のいろいろな面でよい文献である：

E. T. Copson. *Asymptotic Analysis*, Cambridge University Press, London, 1965

N. G. De Bruijn, *Asymptotic Methods in Analysis*, North Holland, Amsterdam, 1961

A. Erdelyi,*Asymptotic Expansions*, Dover, New York, 1956

H. Jeffreys, *Asymptotic Approximations*, Oxford University Press, London, 1962

より最近に出された

F. W. J. Olver, *Asymptotics and Special Functions*, Academic Press New York, 1974

はすばらしい．この本を手短かにまとめたペーパーバック版

Introduction to Asymptotics and Special Functions

も推奨できる．放物型円柱関数に関しては

M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, 1954

の19章を参照せよ．

12章　変分理論

この章では，古典力学と変分理論の話題を扱う．ここで扱う問題は，物理屋にとってめったに研究しない類の対象である．これより少し簡単なものが，数学の文献で多様体や接バンドルなどの理論の裏に垣間見られる程度である．具体的には，どんなときに古典軌道が作用の最小値になっているか，どんなときに単に極値になっているか，を問題にする．

古典力学の作用積分は，

$$S=S[x(t)]=\int_0^T L\,dt, \qquad L=L(x,\dot{x}) \tag{12-1}$$

であるが，これは，x と $\dot{x}=dx/dt$ の関数であるラグランジアン L を経路 $x(t)$ に沿って計算される．$x(0)=a$ と $x(T)=b$ を境界値として決めておき，S を極値にするような経路を探す．関数 $\eta(t)$ を区間 $[0, T]$ で定義された関数とする．ただし，$\eta(0)=\eta(T)=0$．ある固定された $x(t)$ のまわりで S を展開しよう．すなわち，

$$\begin{aligned} S(x+\varepsilon\eta)&=S(x)+\varepsilon\int_0^T\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\dot{\eta}+\frac{\partial L}{\partial x}\eta\right)dt\\ &\quad+\frac{\varepsilon^2}{2!}\int_0^T\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^2}\dot{\eta}^2+2\frac{\partial^2 L}{\partial x\partial\dot{x}}\dot{\eta}\eta+\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\eta^2\right]dt+\cdots\\ &\equiv S+\varepsilon\delta S+\frac{\varepsilon^2}{2!}\delta^2 S+\cdots \end{aligned} \tag{12-2}$$

S が極値をとるとは，$\delta S=0$ のことであり，δS を部分積分すると，変数 x についてのオイラー - ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{12-3}$$

が得られる．しかし，最小かどうかを知るには，$\delta^2 S$ からはじまる高次項が必要である．

$x(t)$ が S を最小にするための必要条件は，明らかに，2次形式 $\delta^2 S$ が負ではないことである．これが要求することの帰結を見ておくために，つぎの関数

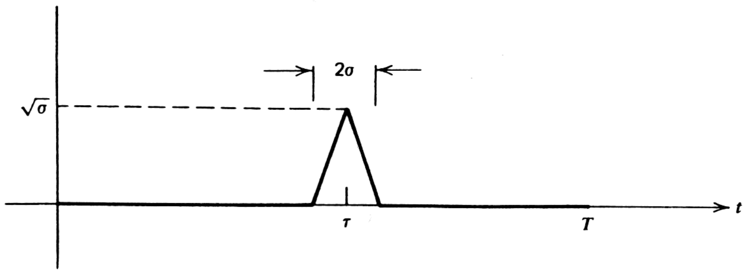


図12-1　関数$\eta_{\sigma\tau}(t)$

$$\eta_{\sigma\tau}(t)\equiv\begin{cases}0 & |t-\tau|>\sigma\\ \sqrt{\sigma}\left(1-\dfrac{|t-\tau|}{\sigma}\right) & |t-\tau|\leqslant\sigma\end{cases} \tag{12-4}$$

を考える(図12-1参照)．$x(t)$に沿ってLの微分がおとなしくふるまうとすると，$\delta^2 S$に主として効く項は$\dot{\eta}^2$からくる．というのは，

$$\int\eta_{\sigma\tau}^2=\mathrm{O}(\sigma^2),\quad \int\eta_{\sigma\tau}\dot{\eta}_{\sigma\tau}=\mathrm{O}(\sigma),\quad \int\dot{\eta}_{\sigma\tau}^2=\mathrm{O}(1)\qquad(\sigma\to 0) \tag{12-5}$$

がなりたっているからである．これは，どんなτおよび任意の微少量σについて成立しなければならないから，ただちにルジャンドル(Legendre)条件

$$\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^2}\geqslant 0 \tag{12-6}$$

が得られる．この種の変分の評価の仕方についてもっと知りたければ，Courant-Hilbertの教科書の変分理論の章を見よ．(12-6)式は，$(1/2)m\dot{x}^2-V(x)$の形のラグランジアンに対しては，$m>0$を意味する．また，リーマン(Rieman)幾何学に対しては，計量が負の固有値をもてないことを意味する．

$\delta^2 S$の正定値性は，$\delta^2 S$自身にともなう変分問題の言葉を使って表現できる．固有関数の変分的性質に知識が足りないと思われたら，読者はふたたびCourant-Hilbertを勉強していただきたい．

われわれが知りたいことは，$\delta^2 S$を負にするようななんらかの関数$\eta(t)$があるかどうか，ということである．もし$\delta^2 S$を最小にする$\varphi(t)$があって，そのとき$\delta^2 S$が正ならば，$\delta^2 S$はすべての関数に対して正のはずである．ただし，関数φは規格化されている必要がある．というのは，一様な境界条件をもつ変分問題では，物理的な大きさの特徴を反映するようなスケールがないからである．というわけで，探すべき関数φは，

$$\int_0^T |\varphi(t)|^2\, dt = 1 \qquad \text{and} \qquad \varphi(0) = \varphi(T) = 0 \tag{12-7}$$

を満たし，

$$\delta^2 S = \int \tilde{L}\, dt \qquad \tilde{L}(\varphi) = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{\varphi}^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\varphi\dot{\varphi} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\varphi^2 \tag{12-8}$$

を最小化するものである．ここで，$\partial^2 L/\partial \dot{x}^2$ などは，経路 $x(t)$ に沿って計算する．規格化は，ラグランジュの未定乗数法で処理する．つまり，φ は $\tilde{L}$ から導かれたオイラー‐ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{\varphi}\right) + \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right]\varphi + \lambda\varphi = 0 \tag{12-9}$$

を満たす．ここで，λ がラグランジュの未定乗数．さらに，(12-9) 式の解になっている φ については，簡単な部分積分によって

$$\begin{aligned}\delta^2 S[\varphi] &\equiv \int_0^T dt \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{\varphi}^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\varphi\dot{\varphi} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\varphi^2\right] \\ &= \lambda \int_0^T \varphi^2\, dt = \lambda \end{aligned} \tag{12-10}$$

となる．したがって，ラグランジュの未定乗数は，われわれが求めている $\delta^2 S$ そのものでもある．

ここまでは，$\delta^2 S$ の最小値を探してきた．しかし，(12-7) 式の条件のもとでの(12-9) 式は，それ以上の意味をもっている．(12-9) 式は，実際，$\delta^2 S$ を2次形式とみなしたときの（これが正しいためには，$\partial^2 L/\partial \dot{x}^2$ が正であることが必要）固有関数と固有値をもつステュルム‐リウヴィル(Sturm-Liouville) 問題になっている．最低の固有値より大きい固有値 λ に対応する固有関数 φ は，$\delta^2 S$ を最小にはしないが，停留値となって(12-10) 式を満たす．

ステュルム‐リウヴィル方程式の性質から，(12-9)式には無限個の固有値と固有関数がある．それらを，

$$\lambda_n, \quad \varphi_n \qquad n = 1, 2, \cdots \qquad (\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots) \tag{12-11}$$

とする．$\{\varphi_n\}$ は，完全直交系をなす．係数 $\partial^2 L/\partial x^2$ などは，停留値の経路 $x(t)$ に沿って計算され，経路とその両端に依存する．したがって λ_n と φ_n は，$b = x(T)$，$a = x(0)$，T の関数になっている．この条件でいくつも極値があれば，それらを区別する必要がある．$t=0$ と $t=T$ でゼロになる任意の関数 $\eta(t)$ は，

$$\eta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(t) \tag{12-12}$$

と書くことができるから，ただちに，

$$\delta^2 S[\eta] = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2 \tag{12-13}$$

を得る．

$\delta^2 S$が正定値かどうかは，結局，すべての固有値λ_nが正か否かということに帰着する．したがって，もし

$$\lambda_n > 0 \qquad \text{すべての}\,n\,\text{に対して} \tag{12-14}$$

ならば，$x(t)$は最小．逆に，どのnであっても，$\lambda_n<0$があれば，$x(t)$は最小でないのは明らか．特に，十分小さなεに対して

$$S(x+\varepsilon\varphi_n) = S(x) + \varepsilon^2 \lambda_n + O(\varepsilon^3) < S(x) \qquad \text{ただし}\,\lambda_n<0 \tag{12-15}$$

となる．

つぎの形のラグランジアン

$$L = \tfrac{1}{2} m\dot{x}^2 - V(x) \tag{12-16}$$

を考えよう．ただし，いまから得る結論は，この形にかかわらずかなり一般的である．十分小さなTに対しては，運動エネルギーが支配的で，Vに特異点がなければ，経路は1つだけで（Vによる補正項が現われるまでは）

$$x(t) = a + \frac{(b-a)t}{T} \tag{12-17}$$

と近似できる．この経路とラグランジアンに対して，(12-9)式は

$$m\ddot{\varphi} + \left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x(t)} \varphi + \lambda\varphi = 0, \qquad \varphi(0) = \varphi(T) = 0 \tag{12-18}$$

となる．(12-18)式のディリクレ(Dirichlet)境界条件のため，この方程式は，無限に高い井戸のシュレーディンガー方程式の問題と同等である．井戸壁が接近するにしたがって($T\to 0$)，基底状態のエネルギーは大きくなって（これは，本質的に不確定性原理そのものだ），この極限では，ポテンシャルからくる項はふたたび無視することができる．この近似では(12-18)式の解は，

$$\lambda_n = m\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2, \qquad n=1,2,\ldots$$

$$\varphi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}}\ \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \tag{12-19}$$

である．十分小さなTに対しては，(12-17)式で近似される古典軌道$x(t)$は，単に極値というだけではなく，実際，作用の最小値になっている．

大きなTに対しては，当然，上の証明はなりたたない．したがって，最小値になっている軌道$x(t)$からオイラー‐ラグランジュ方程式を満たしながら進んでいくと，ある段階でこの最小性を失う点にぶつかる可能性がある．これが，われわれの調べたい現象である．

ここまでで，われわれの視点が少し変化してきていることに気づいているだろうか．もう境界値問題($x(0)=a$, $x(T)=b$)を見ているわけではなく，いまは，時刻ゼロでaから出発するある特定の軌道($x(0)=a$，$\dot{x}(0)=v$，ただしaとvが与えられている）に注目している．この軌道$\bar{x}$の上で，時刻$t=T$に別の1点$b=\bar{x}(T)$をとることができ，この1対の端点($x=a$, $t=0$)と($x=b$, $t=T$)に対して境界値問題を考える．上のパラグラフの結論は，十分に小さいTに対して，曲線$\bar{x}(\tau)$，$0\leqslant\tau\leqslant T$がその境界値問題の作用を最小化するということだった．大きなTに対しては，$\bar{x}$はただの極値かもしれない．しかしいずれにせよ，この境界値問題は，与えられたTに対してステュルム‐リウヴィル方程式を定義し，逆にその固有値の組は，Tの関数になっている．小さなTに関しての$\bar{x}$の最小性については，つぎのようにいいかえることができる．すなわち，

$$\lambda_n(T)>0,\quad \text{十分小さい}T\text{に対しては，すべての}n\text{で}\lambda_n(T)>0 \tag{12-20}$$

Tが増大すると，固有値は一般に数値的に小さくなり，$x(t)$（バーは落してある）は，

$$\lambda_1(T)=0 \tag{12-21}$$

をもつTの時点で最小値をとらなくなる．Tが小さい領域については，固有値が減少していくことは(12-19)式で確かめられる．しかし，大きなTではこの保証はないし，λ_1が本当にゼロに到達するという保証もない．(12-21)式がなりたつ点$b=x(T)$は，特に重要であり，$x(t)$が出発する点aの共役点とよばれる．したがって，軌道$x(t)$に沿ってbがaに共役であるならば，つぎの微分方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{\varphi}\right) + \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right]\varphi = 0 \tag{12-22}$$

が存在する．その境界条件は$\varphi(0)=\varphi(T)=0$であり，Lの微分は，($t=0$で) aを出発し($t=T$で) bに到達する極値関数$x(t)$に沿って計算される．(12-6)式のラグランジアン$L=(1/2)m\dot{x}^2-V(x)$に対しては，(12-22)式は簡単になり，

$$m\ddot{\varphi}+\left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x(t)}\varphi=0 \tag{12-23}$$

となる．この式は，本書の早い段階で，2次形式のラグランジアンの場合の経路積分に関連して現われた［(6-31)式を見よ］．これが偶然ではないことはすぐわかる．この方程式は，変分問題に関してその重要性を示したJacobiにちなんで，ヤコビ方程式とよばれている．ヤコビ方程式の解は，ヤコビ場として知られている（量子場の理論では，このモードはゴールドストーン(Goldstone) ボソンに対応する）．

ひとたび最初の共役点をすぎてしまうと，$x(t)$はもはや最小ではなくなる．おそらくこれは，固有値$\lambda_1(T+\varepsilon)$に関する摂動論を使って示すことができるだろうが，ここではそのかわりに$\delta^2 S$が負になる経路を直接与えよう．

Tを，$x(t)$が$a=x(0)$の共役点bを通過する際の時刻とする．また，$\varphi(t)$, $0\leqslant t\leqslant T$をそのヤコビ場とせよ．$0\leqslant t\leqslant T'=T+\varepsilon$（$\varepsilon$は正定数）の間で$x(t)$を考え，この経路の変分を$\xi(t)$とする．これには，$\xi(0)=0$と$\xi(T+\varepsilon)=0$を要求する．$\delta^2 S<0$となる経路$y(t)$をつくってみよう．与えられた$c$（あとで特定する）に対して，

$$y(t)\equiv\begin{cases}\dfrac{1}{c}\varphi(t)-c\xi(t) & 0\leqslant t\leqslant T\\ -c\xi(t) & T\leqslant t\leqslant T+\varepsilon\end{cases} \tag{12-24}$$

とする．そのとき，

$$\delta^2 S[y]=\int_0^{T+\varepsilon}dt\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^2}\dot{y}^2+\cdots\right]=\int_0^{T}dt\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^2}\dot{y}^2+\cdots\right]+\mathrm{O}(c^2) \tag{12-25}$$

と書くことができる．(12-24)式で定義されたyを0からTまでの積分に代入すると，ヤコビ場の定義により$\delta^2 S[\varphi]$の項が落ちる．こうして，cのオーダーまでは，ξとφを含む交差項のみが残る．交差項の部分積分を実行し，φがヤコビ方程式を満たすという事実を使うと，

$$\delta^2 S[y]=-2\xi(T)\left.\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{x}^2}\right|_T\dot{\varphi}(T)+\mathrm{O}(c^2) \tag{12-26}$$

が得られる．ここまでは，ξは任意でよかった．ここで，ξを

$$\xi(T)=\dot{\varphi}(T) \tag{12-27}$$

と選ぶ．すると，十分小さいcに対して，

$$\delta^2 S < 0 \tag{12-28}$$

となることがわかる．

いままでの議論のなかのある段階では，位置xについて1次元に限定されたように見えたところもあるかもしれないが，適当な記号の置きかえによって，結果は一般的になりたつことを指摘しておこう．たとえば，φはtの関数のベクトルで，$\partial^2 V/\partial x^2$は行列とすればよい．

ヤコビ方程式に到達するには，もう1つ方法がある．それによると，量子力学との関連で新たな見通しを与えられ非常に役に立つ．時刻0でaを出発する（到着点を明示しない）停留値の経路の集合を考えよう．その1本1本を初期値の運動量pでラベルしよう，つまり，軌道は

$$x(p, t) \tag{12-29}$$

と

$$x(p, 0) = a,\quad \text{すべての}p \tag{12-30}$$

で指定される．2つの互いに隣りあう極値が，どのような関係で離れていくかを調べたい．そのために，つぎの量

$$J(p, t) = \frac{\partial x(p, t)}{\partial p} \tag{12-31}$$

を考えよう．2つの軌道の差は，これを使って

$$x(p+\varepsilon, t) - x(p, t) = \varepsilon J(p, t) + O(\varepsilon^2) \tag{12-32}$$

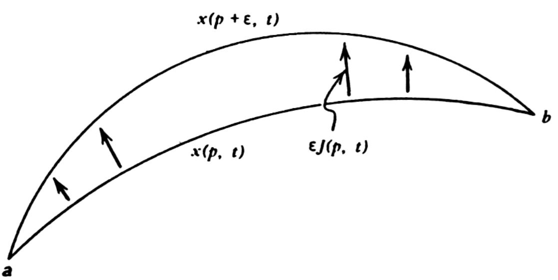


図12-2　点aを出て，共役点bで出会う2つの経路$x(p, t)$と$x(p+\varepsilon, t)$，ただし$\varepsilon \to 0$．両方ともオイラー - ラグランジュ方程式を満たす．同時刻の$x(p, t)$と$x(p+\varepsilon, t)$を結ぶベクトルは，ヤコビ場$J(p, t)$に比例する．焦点では，$J(p, t)$はゼロである．

と表わされる．図12-2を見よ．$x(p, t)$が

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{12-33}$$

を満たすので，(12-33)式をpで単純に微分すると，Jが

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{J}\right)+\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right]J=0 \tag{12-34}$$

を満足することがわかる．これは，正にヤコビ方程式である．(12-30)式によって，

$$J(p, 0)=0 \tag{12-35}$$

である．さらに，もっとも単純なラグランジアンに対しては，$\dot{x}(p, 0)$とpは，$p=m\dot{x}(p, 0)$で関係づけられている．外部磁場がある場合には，ベクトルポテンシャルが加わる．いずれにせよ，

$$\frac{\partial \dot{x}(p, 0)}{\partial p}=\frac{1}{m}, \qquad \text{つまり} \qquad \frac{\partial J(p, 0)}{\partial t}=\frac{1}{m} \tag{12-36}$$

がなりたつ．こうしてJは，非ゼロの微分をもって，値ゼロから出発する．共役点は，あるTで

$$J(p, T)=0 \tag{12-37}$$

が発生した点で起きる．2つの隣りあう軌道のずれを使って，つぎのような描像を描くことができる：$J(p, T)$がゼロになる運動量の方向に沿って，始点を出ていく軌道の族がある（図12-2参照．また，ここで使った「運動量の方向」という言葉は，すぐあとで定義する多次元版で正確に表現する．1次元ならもちろん，1つしか方向がない）．しかし，$J(p, T)=0$によって，これら軌道は点bでふたたび1か所に集まる．このような理由から，共役点はしばしば焦点ともよばれる．

n次元では，xは，x_i, $i=1, \ldots, n$のように番号づける．初期点を離れる停留軌道は，nパラメータの族をなしているが，これらのパラメータはp_k, $k=1, \ldots, n$でラベル化することができる．1次元での議論と同様に，

$$x_i(p, 0)=a_i,\ \text{すべての}P;\ \ J_{ik}(p, t)=\frac{\partial x_i(p, t)}{\partial p_k} \tag{12-38}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial \dot{x}_l}\dot{J}_{lk}\right)+\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial x_l}-\frac{\partial^2 L}{\partial x_i \partial \dot{x}_l}\right)\dot{J}_{lk} + \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial x_l}\right)-\frac{\partial^2 L}{\partial x_i \partial x_l}\right]J_{lk}=0 \tag{12-39}$$

$$J_{ik}(p,0)=0 \qquad \frac{\partial J_{ik}(p,0)}{\partial t}=\left(\frac{1}{m}\right)\delta_{ik} \tag{12-40}$$

$$\det J_{ik}(p,T)=0 \quad x_i(T)\text{が焦点のとき} \tag{12-41}$$

とすればよい．(12-39)式は，相対論でおなじみの測地線の微小ずれに関する方程式に対応している．

それぞれのtと$x(t)$に対して，J_{ik}は，kでラベルされたn次元のベクトルの集合と考えることができる．時刻ゼロでk方向を向いていたあるベクトルが，時刻tに到達した点で向いている方向を表わしている．焦点では，J_{ik}はゼロになり，これらのベクトルが，$x(t)$で接ベクトル空間をもはや張りえない，という条件を表わしている．行列式Jがゼロなので，ゼロ固有値をもつ固有関数（それをu_kとする）があって，

$$\sum_k J_{ik}(T)u_k=0 \tag{12-42}$$

を満たしている．ここで，u_kはただの数である．そこで，関数

$$\varphi_i(t)=\sum J_{ik}(t)u_k \tag{12-43}$$

を考える．(12-40)式と(12-42)式によって，$t=0$とTでは，この関数は消えてしまうと同時に，(12-39)式の線形性によってヤコビ方程式を満たす．つまり，$n(n>1)$次元では，焦点にはそれにともなう方向（実際，一般にコースティクス面とよばれる幾何学的構造の一部分になっている）というものがある，ということだ．

Jは1点でゼロ固有値を2個以上もつ可能性があり，一般的にいって，実際に起きる．このような高次の焦点は，しばしば対称性の議論から場所が特定できることがある．

量Jは，作用積分を用いても書くことができる．端点aとb，時刻$t=0$と$t=T$を考えよ．この条件で極値の古典経路をとる．端点を少し変えていくと，一般に軌道も少しだけずれていく．これらの軌道上の作用積分をそれぞれ，$S(b,T;a)$と書く．1次元ならば，運動量$p(0)$の初期値は，

$$p(0)=-\left.\frac{\partial S}{\partial a}\right|_{b,T} \tag{12-44}$$

で与えられる．普通，運動量というと$\partial L/\partial\dot{x}$を考えるが，Goldsteinの教科書（参考文献参照）のあとのほうまで勉強した人には，(12-44)式がなじみ深い[(3-10)式も見よ]．もちろん，$p(0)$はこれまでpと書いてきたもののことだが，(12-44)式では境界値で押さえられているので，ここではbとTの関数と考えることもできる．(12-44)

式をbで微分すると

$$\frac{1}{J}=\frac{\partial p}{\partial b}=-\frac{\partial^2 S}{\partial a\,\partial b} \tag{12-45}$$

を得る．同じようにして，$n\,(n>1)$次元では，(12-44)式のn次元版を使って，aを始点，bを終点として，J_{ik}と$\partial^2 S/\partial b_i \partial a_k$が互いに逆行列になっていることが示される．

行列式Dを

$$D=\det\left[-\frac{\partial^2 S}{\partial a_k\,\partial b_l}\right] \tag{12-46}$$

で定義する．これは，WKB近似の中では代表的な量で，経路の密度と解釈されている．[(12-39)式および上の説明から，これがヤコビ場の行列式の逆数であることはもうわかっている]．この解釈は，つぎのように連続の式

$$\frac{\partial D}{\partial t}+\sum_k \frac{\partial}{\partial b_k}(v_k D)=0 \tag{12-47}$$

から正しいと判断できる．ただし，v_kは時刻Tの速度である．(12-47)式を証明するために，ラグランジアンから通常の方法で導かれるハミルトニアン$H(x,\,p)$を使う．すると，作用積分は，

$$\frac{\partial S(x,t;a)}{\partial t}+H\left(x,\frac{\partial S(x,t;a)}{\partial x}\right)=0 \tag{12-48}$$

を満たす．Hを使うと

$$v_k=\frac{\partial H}{\partial p_k} \tag{12-49}$$

だから，vはまたxとpの関数である．(12-48)式をa_jとx_kで1回ずつ微分し，$x=b$と置いたあと，いくつか計算すると(12-47)式が得られる．

焦点では，Dは無限大（Jはゼロ）．こうして，多数の（少なくとも1パラメータをなす族の）経路が再び1点に集まる．たとえば，調和振動子では，作用積分は，

$$S=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[(a^2+b^2)\cos\omega T-2ab\right]$$

そして，

$$\frac{\partial^2 S}{\partial a\,\partial b}=-\frac{m\omega}{\sin\omega T}$$

これは，半周期ごとに無限大になる．このため，“波動関数”は，半周期ごとにデルタ関数になってしまう．

演習：　$(1/2)\dot{x}^2-V(x)$，$V(x)=\lambda e^x$，$\lambda>0$のラグランジアンに対して，オイラー‐ラ

グランジュ方程式の解を与えよ．どんな物理的状況で境界値問題$x(0)=x(T)=a$は，0個，1個，2個の解をもつか．ヤコビ方程式は閉じた形で解ける．この境界値問題の結果は，ヤコビ方程式の解のゼロ点に関してなにか意味があるだろうか．

この章を閉じるにあたって，証明抜きで（しかしコメントつきで）変分理論の結果をつけ加えておこう．

最初に，有名なモース(Morse)指数の定理．これは，経路の焦点と$\delta^2 S$の負固有値の関係を与える．この関係の一部は，すでに上で述べた．

定義：　双線形汎関数の指数とは，負定値の固有値をもつ空間の次元であるとする．

われわれの問題では，$\delta^2 S$の指数は，$\lambda_n<0$となる固有値λ_nの数である．経路に沿って移動すると，$\delta^2 S$の指数も変わりうる．それは，初期点に共役の点だけで変わる．なぜならそこで固有値がゼロを通るからである．モースの指数定理には，もっと強い主張が含まれている：

定理 (Morse)：　$x(t)$ $(0\leqslant t\leqslant T)$をSの極値とせよ．$\delta^2 S$の指数は，曲線$x(t)$ $(0\leqslant t\leqslant T)$に沿って存在する$x(0)$の共役点の数に等しい．ただし，それぞれの共役点は，その多重度を含めて勘定する．

(12-24)式とそれに続く式では，曲線が共役点を通過するたびに$\delta^2 S$が負固有値をひろってくる例を示したわけである．実際は，そこで示したことが指数定理の証明の一部を構成している．

モース定理の参考文献としては，MilnorとMorseの著書がある．何年か前，モース理論の別の面が物理学の文献に現われた．Van Hoveは，固体のフォノンスペクトルの特異点に関連して，そのなかの空間で定義された関数が必然的にもたなければならない鞍点の数に対してモース理論を適用し，ある種の結論を得ることに成功した．

以下，変分理論の十分条件について，記録の意味で，結果だけを残しておく．数学のこの分野の歴史には，必要性と十分性とを十分に区別していない例がいっぱいある(あとのBlissのモノグラフを参照)．以下の例では，「最小」という語は，いつものように，局所的な最小を意味している．

作用積分$S=\int_0^T L(x, v, t)dt$, $v=dx/dt$と，$d(\partial L/\partial v)dt-\partial L/\partial x=0$を満たす極値の$x(t)$とを考える．ワイエルシュトラース(Weierstrass)のE-関数を

$$E(t,x,v,w)\equiv L(x,w,t)-L(x,v,t)-(w-v)\frac{\partial L}{\partial v}(x,v,t) \quad (12\text{-}50)$$

のように定義する．このとき，$x(t)$ が強い最小であるための十分条件を与えることができる：

定理： つぎの3つの条件が満たされたとする．

(1) $x(t)$, $0\leqslant t\leqslant T$ に沿って $x(0)$ には共役点がない．

(2) $\partial^2 L/\partial v_i \partial v_j$ は正定値．

(3) $(t, x, dx/dt)$ に十分近いすべての点 (τ, x, v) に対して，$E(\tau, x, v, w)>0$ がなりたつ．ただし，すべて $v\neq w$.

このとき，$x(t)$ は，$\xi(0)=x(0)$ と $\xi(T)=x(T)$ を満たす曲線 $\xi(t)$ のうちで，強い最小である．

$L=(1/2)v^2-U(x)$ に対しては，条件(2)と(3)は，自動的に満たしているから，共役点だけを調べればよい．

ノート

変分理論のすばらしい紹介が，有名な教科書

R. Courant and D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, Vol.1, Interscience, New York, 1953

に載っている．もう1冊有名な本

H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1959

では，変分理論と本章の後半で扱った作用積分の性質について議論している．

モース理論については，

J. Milnor, *Morse Theory*, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1963

M. Morse, *Variational Analysis*, Wiley, New York, 1973

を見よ．もう1冊，よい参考書で，読みやすいのは

M. M. Postnikov, *The Variational Theory of Geodesics*, Saunders, Philadelphia, 1967

である．固体のフォノンスペクトルの特異性への応用は，

L. Van Hove, The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal, *Phys. Rev*. **89**, 1189 (1953)

によってなされた．ワイエルシュトラースの E-関数は

G. A. Bliss, *Calculus of Variations*, Mathematical Association of America,Open

Court, La Salle, Ill., 1925
に詳しく載っている.

13章　WKB近似と非調和振動子への応用

WKB近似を導くというのは，結局，任意のラグランジアンを2次形式のそれに置きかえ，6章の結果にのっとって，その経路積分を実行することが正しいかどうかを問うことと同等である．それは，$\hbar\to 0$ の極限で，漸近近似が正しいかどうかということでもある．以下の証明にはいくつか穴があるけれども，できるだけ溝が小さくなるようにしたい．ここでの理論展開は，いちばん簡単なものではないが，コースティックスの研究などで，一般化が容易だというメリットがある．

つぎのラグランジアンを

$$L=\tfrac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2+\frac{e}{c}\dot{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{A}-V(\mathbf{x}) \tag{13-1}$$

考え，$G(\mathbf{b},T;\mathbf{a})$ を計算したい．しばらくの間，$(\mathbf{a},0)$ から $(\mathbf{b},T)$ へのただ1本の古典軌道 $\bar{\mathbf{x}}(\tau)$ だけを考える．いまからすることは，おおざっぱにいって，経路積分での変数を $d\mathbf{x}(\tau)$ から $d\mathbf{y}(\tau)$ に変換することである．ただし，$y(\tau)=\mathbf{x}(\tau)-\bar{\mathbf{x}}(\tau)$．(6-13)式でやったように，作用は，$\mathbf{y}$ を使って書くことができる．ここではしかし，$\delta^3 S$ と $\mathbf{y}$ の高次項が消えないで残り，経路積分は

$$G(\mathbf{b},T;\mathbf{a})=e^{iS(\bar{\mathbf{x}})/\hbar}\int_{(\mathbf{0},0)}^{(\mathbf{0},T)}d\mathbf{y}(\tau)$$

$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2!}\delta^2 S(\mathbf{y})+\frac{1}{3!}\delta^3 S[\mathbf{y}]+\cdots\right]\right\} \tag{13-2}$$

のようになる．ただし，

$$\delta^2 S[\mathbf{y}]=\int_0^T d\tau\left\{m\dot{\mathbf{y}}^2+2\frac{e}{c}\frac{\partial A_k}{\partial x_i}y_i\dot{y}_k+\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_k}\left[A_i\dot{\bar{x}}_i-V\right]y_jy_k\right\}$$

$$\delta^3 S[\mathbf{y}]=\int_0^T d\tau\left\{\frac{3e}{c}\frac{\partial^2 A_i}{\partial x_j\partial x_k}y_jy_k\dot{y}_i+\frac{\partial^3}{\partial x_j\partial x_k\partial x_l}\left[A_i\dot{\bar{x}}_i-V\right]y_jy_ky_l\right\} \tag{13-3}$$

(和に対する慣用記法を使っている.) この段階で, 停留位相法の論法を使って, y の3次の項, つまり $\delta^3 S$ などが, $\hbar\to 0$ の極限で $\hbar$ のオーダー程度に小さいことを示したくなるだろうと思う. とりわけ, (11-18) 式のような形になっていることから, $\hbar\to 0$ の漸近領域で, 指数関数の中の2次の項だけが積分を支配するようになる, と主張したくもなる. もちろん, このまま進んで, $\delta^3 S$ を含む $\hbar$ の漸近級数を考えるのもよいかもしれない. しかし, ここでは, 視線をもう少し低く構えてみよう.

発見法的な議論を続けることにして, もし本当に主要な項が2次の項だとすると, 3章のように [(3-6)式のあとの議論を見よ]

$$\frac{\delta^2 S[\mathbf{y}]}{\hbar} = O(1) \qquad (\hbar\to 0) \tag{13-4}$$

のはずである. これは, $\mathbf{y}$ が $\sqrt{\hbar}$ のオーダーにあるという, 半古典論の重要な事実を意味する. したがって, 量子効果は古典軌道から $\sqrt{\hbar}$ に比例する程度の距離で効いてくる, ということになる. もちろん, ほかのいくつかの次元をもつ量があるので, $\hbar$ だけで量子効果が効いてくる距離の大きさを決めることはできない. もし, いま,

$$\mathbf{y} = O(\sqrt{\hbar}\,) \qquad (\hbar\to 0) \tag{13-5}$$

を仮定すると, $\mathbf{y}^3$ のようにふるまう $\delta^3 S$ が, $\sqrt{\hbar}$ の項を追加することになるので,

$$\frac{\delta^3 S}{\hbar} = 0(\sqrt{\hbar}\,) = o(1) \qquad (\hbar\to 0) \tag{13-6}$$

となる. さらに高い S の変分量は, もっと小さくなり, $\hbar$ のオーダーで $\delta^2 S$ だけがWKB 近似に最大の寄与をなす. もし, $\delta^2 S$ のみの寄与ということになると, $d\mathbf{y}(\tau)$ の経路積分の計算は, 厳密に2次形式のラグランジアンでやったことと同じである. (ここでは, ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ がある分だけ異なっているが, 前の結果は変わらない.)

(6-35) 式から, 1次元での2次形式のラグランジアンの経路積分は,

$$G(b,t_b;a,t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar f(t_b,t_a)}}\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(b,t_b;a,t_a)\right) \tag{13-7}$$

で, $S(b,\ t_b\ ;a,\ t_a)$ は, 古典軌道に沿った作用積分. また, f は, 次式を満たす,

$$m\frac{\partial^2 f(t,t_a)}{\partial t^2} + c(t)f(t,t_a) = 0$$

$$f(t_a,t_a) = 0, \qquad \left.\frac{\partial f(t,t_a)}{\partial t}\right|_{t=t_a} = 1 \tag{13-8}$$

ただし，$L=(1/2)m\dot{x}^2-(1/2)cx^2+ex$．(13-8)式を(12-34)式から，(12-36)式までの式と比較すれば，fと$J=\partial x(p,t)/\partial p$はまったく同じ線形方程式を満たし，その境界条件は互いに比例関係にあるということがわかる．さらに，(12-45)式により，Jは正に$-1/(\partial^2 S/\partial b\partial a)$だから，

$$G(b,t_b;a,t_a)=\sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial b\,\partial a}}\ \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) \tag{13-9}$$

となる．

n次元では，この式は一般化されて

$$G(\mathbf{b},t_b;\mathbf{a},t_a)=\sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial\mathbf{b}\,\partial\mathbf{a}}\right)}\ \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) \tag{13-10}$$

となる．この式が(13-9)式の正しいn次元系への拡張になっていることは，直接確かめることができる．(13-10)式のGは，ラグランジアンが(13-1)式で与えられる系のプロパゲータに対する近似と考えられる．しかし，実際には，(13-3)式の2次形式の作用積分$\delta^2 S$に対しては厳密なプロパゲータである．［これは，$\delta^2 S$の2次形式のラグランジアンに対応するハミルトニアンを直接Gに施してみれば簡単に証明することできる］．こうして，Gは$\delta^2 S$までで打ち切ったものに対する厳密解なのだから，形式的に，（一般の）真のプロパゲータに対する（$\hbar$のオーダーでの）第1次近似になっている．

別の観点からも，(13-10)式は，注目すべき結果である．それは，常微分方程式の解と2次形式の行列式の関係を明らかにしているからである．$n>1$次元では，1次元の場合と同様に，(13-10)式の平方根のなかの量は，$\delta^2 S$の行列式である．ただし，($\varepsilon^{N/2}$と経路積分の無限規格化定数に現われる似たような項の結果として）発散は適当に除かれてはいる．しかし，12章で見たように，平方根のなかの量は，ヤコビ方程式にしたがうn次元の場の行列式の逆数でもある．$n>1$次元では，6章で使った証明，すなわち，行列式の展開を漸化式で解くことから微分方程式へ移行するやり方はいくらか複雑になる（Papadopoulisがそれを行なった）．多次元に拡張しやすい，しかしあまり直接的ではない証明は，LevitとSmilanskyによって与えられた．

以上，(13-10)式は

$$G(\mathbf{b},t_b;\mathbf{a},t_a)=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{n/2}\sqrt{D}\ e^{iS/\hbar}=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{n/2}(\det J_{ij})^{-1/2}e^{iS/\hbar} \tag{13-10a}$$

とも書くことができる．ここで，Dは(12-46)式で与えられ，J_{ij}は(12-38)式から(12-40)式までを満たす．

最後に，ちょっと間接的ながら，とても美しいColemanによる証明を与えておこう．これは，複素関数の性質を利用する．つぎの関数を定義する

$$f(z)=\frac{\det(-\partial^2/\partial t^2+W-z)}{\det(-\partial^2/\partial t^2-z)}$$

$$g(z)=\frac{\varphi_{W-z}(T)}{\varphi_{-z}(T)}$$

ここで$\det(-\partial^2/\partial t^2+U)$は，0と$T$でディリクレ境界条件をもつシュレーディンガーのハミルトニアン$-(\partial^2/\partial t^2)+U$の，固有値の積のことである．規格化された関数$\varphi_U$は，

$$\frac{-\partial^2\varphi_U}{\partial t^2}+U\varphi_U=0$$

の解で，境界条件として$\varphi_U(0)=0$, $d\varphi_U(0)/dt=1$を満たす．われわれの定理は，単に$f(0)=g(0)$だけを主張する．しかし，Colemanは，この2つの関数がzの全領域で実際に等しいことを示した．まず，これらの極とゼロ点は等しい．なぜなら，$t=T$でゼロになる$\varphi_U(t)$は，それぞれに対応するディリクレ境界値問題のゼロ固有値をもつ固有関数になっているから．さらに，おそらくRe $z>0$, Im$z=0$を除いて，$|z|\to\infty$でfもgも1に近づく．というわけで，fとgは等しい．

(13-10)式の行列式は，ヴァン・ブレック(Van Vleck)行列式として知られている．彼は，それが半古典論で有用であることを1920年代にすでに発見していた．経路積分が発展した初期のころ，C.Morette（現DeWitt-Morette）は，あるプロパゲータにはヴァン・ブレック行列式を含める必要があることを発見した．のちに，PauliとB. DeWittは別の文脈のなかで，その新しい役割を考えた．

ここまでは，1つの停留値の場合だけを考えてきた．複数個ある場合には，x_α, x_β, …と番号づけをしよう．もし，$(x_\alpha-x_\beta)^2\delta^2S\gg\hbar$なら，グリーン関数はそれぞれの寄与からの和でよい．（1次元の停留位相近似参照.）この不等式がなりたたないときには，経路が焦点の近くを通っている．これについては15と16章で別途考える．

ウイーナー積分の漸近公式に類似の公式の厳密な証明は，Schilder, Varadhan, Donskerの論文で与えられた．ウイーナー積分には，厳密に定義できる測度があることに加え，実数の指数関数$e^{-\lambda x^2}$のために，その漸近近似ではラプラス法が使える利点がある．一方，量子力学の経路積分は，複素関数($e^{i\lambda x^2}$)による停留位相法と格闘しなければならない．

(13-9)式の（疑似的な）証明を与える前に，その応用を見ておく．もっとも単純な非線形問題として広く調べられている非調和振動子がそれである．しかし，実際は，単純でもなんでもない．以下で述べる仕事は，Lamのものである．本書のうしろのほうで，統計力学への応用を見るが，Langerの方法とその非調和振動子への応用を調べる．そこでは，インスタントンについても述べるが，本章では，これらの概念は入れない．

ラグランジアン

$$L=\tfrac{1}{2}\dot{x}^2-\tfrac{1}{2}\omega^2x^2-\tfrac{1}{4}\lambda x^4, \qquad \omega^2, \lambda>0 \tag{13-11}$$

を考える．$\lambda\to0$の場合を問題とする．つぎの4つの方法で調べる．すなわち，摂動論，停留位相法，有効場近似，そして，複素スケーリングである．

最初に，11章で出てきたタイプの積分（厳密に同じではないが）

$$I=\int_0^\infty dx\, e^{i(x^2-\lambda x^4)} \tag{13-12}$$

を調べよう．前に見たように，これは放物型円柱関数に関係している．まず，「結合定数」λに関する摂動論を見ると

$$\begin{aligned} I&=\int_0^\infty dx\, e^{ix^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\lambda)^n}{n!}x^{4n} \\ &\sim\tfrac{1}{2}\sqrt{i}\ \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^n}{n!}\Gamma\!\left(2n+\tfrac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{13-13}$$

となる．これは，前に出てきたとおり，収束半ゼロの漸近級数である．

つぎは，停留位相近似を考えよう．$x=y/\sqrt{\lambda}$とする．Iは

$$I=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\int_0^\infty \exp\left[\frac{i}{\lambda}\left(y^2-y^4\right)\right]dy \qquad \frac{1}{\lambda}\to\infty \tag{13-14}$$

と変換され，その停留点は，

$$y=0, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{13-15}$$

である．$y=0$の方の項は，上の漸近級数になる．$y=1/\sqrt{2}$については，この点のまわりで指数関数の中を展開する．$u=y-1/\sqrt{2}$と置く．また，aを0と$1/\sqrt{2}$の間にあり，どちらか一方から少なくとも$\sqrt{\lambda}$は離れている，ある数とする．この停留点からの寄与をI'と書くと

$$I' = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-a}^{\infty} du \exp\left\{ \frac{i}{\lambda} \left[\tfrac{1}{4} - 2u^2 - u^3(2\sqrt{2} + u) \right] \right\}$$

$$= e^{i/4\lambda} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{-a}^{\infty} du\, e^{-2iu^2/\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\lambda} \right)^n \frac{\left[u^3(2\sqrt{2} + u) \right]^n}{n!} \qquad (13\text{-}16)$$

となる．これも(13-13)式に似た漸近展開にできる．I の主要項の和は，

$$I \sim \tfrac{1}{2}\sqrt{i\pi}\,(1 + i\sqrt{2}\, e^{i/4\lambda}) \qquad (13\text{-}17)$$

である．(13-16)式と(13-17)式の特徴的な点は，真性特異点 $\exp(i/4\lambda)$ がついていることであるが，摂動論(13-13)式には，これがない．見かけ上うまくいっている摂動論では，この本質的な特異点がどうなっているのか，長い間研究者を悩ませてきた．Dysonの初期の論文がその一例で，彼は，α（QEDの展開パラメータである微細構造定数）の符号をひっくり返したときに期待されるカタストロフィーを物理的に議論することによって，QEDの摂動展開が発散することを（勇敢にも）示唆した．以下に，非調和振動子の展開に，特異点があることを見る．それで，4次の項の符号を変えたときに起きる劇的な変化がはっきりする．

(13-12)式の積分を評価する3番目の方法は，統計力学における「有効場」の近似である（これは，「19世紀的積分」を解くためのちょっとした機械的方法になりつつある．しかし，ここで引用するいくつかの類似の積分には，それだけの価値がある）．x^4 を μx^2 で置きかえ，x^2 の期待値に実際上等しくなる μ の値を探すのだ．その置きかえを行なって，

$$I = \int_0^{\infty} dx\, e^{ix^2(1-\lambda\mu)} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{i\pi}{1-\lambda\mu}} \qquad (13\text{-}18)$$

と置く．値 μ を選ぶために，近似積分 I 自体が一種の期待値の定義に使える（これは，統計力学では自然なやり方である）．すなわち，実関数 f に対して，

$$\langle f(x) \rangle = \left| \frac{\int dx\, f(x) e^{ix^2(1-\lambda\mu)}}{\int dx\, e^{ix^2(1-\lambda\mu)}} \right|$$

を期待値としてとるのである．こうして，

$$\mu = \langle x^2 \rangle \qquad (13\text{-}19)$$

を要求すると，

$$\mu=\frac{1}{2(1-\lambda\mu)}$$

となる．λが小さいときには，近似解

$$\mu=\frac{1}{2},\quad \frac{1}{\lambda}-\frac{1}{2}$$

が得られる．最初の解を(13-18)式に代入すると，収束する摂動展開が得られる．2番目の解が，やや弱い特異点$I\sim 1/\sqrt{\lambda}$をもたらす．最もナイーブな摂動論にくらべれば，この方法は理論構造がよくわかるが，それでもまだ足りない点がたくさんある．また，μを選ぶ基準に任意性もある．たとえば，(13-19)式のかわりに，$\langle\mu x^2\rangle=\langle x^4\rangle$を採用したほうがよいかもしれない．これで，定数のいくつかが変わってくる．

最後に，複素スケーリングを調べよう．$\lambda=0$の特異点の性質が厳密に明らかにできるわけではないが，解析接続と一緒に利用すると役に立つ．λの関数として，$I(\lambda)$は，$\mathrm{Re}(i\lambda)>0$つまり$\mathrm{Im}\lambda<0$では明らかに解析的である．新しい変数$y=x/\alpha$を使って，

$$I(\lambda)=\alpha\int_0^\infty dy\exp(i\alpha^2y^2-i\lambda\alpha^4y^4) \tag{13-20}$$

と書く．αが実であるかぎり，なにも変わらない．ここで，$\alpha=\exp(i\varphi)$としてみよう．Im $(\lambda\ \exp(4i\varphi))<0$なら，積分が存在する．十分小さい$\varphi$に対しては，変換の前後でともに積分を定義する$\lambda$の値がある．積分経路$z=R\exp(i\psi)$，$-4\varphi\leqslant\psi\leqslant 0$に沿って$R\to\infty$では積分は消えるから，$I$の値は同じである．しかし，$I(\lambda)$は，Im $\lambda<0$を越えるλに対しても定義でき，こうして，$I(\lambda)$は解析接続された．この自由度を使ってy^4項のどんな位相も回避した上，スケール変換もできる．具体的には，

$$\alpha=(i\lambda)^{-1/4}$$

としてみよう．このとき積分は，

$$I(\lambda)=(i\lambda)^{-1/4}\int_0^\infty dy\exp\left[i(i\lambda)^{-1/2}y^2-y^4\right]$$

となる．(ただし，yは実)．したがって，$I(\lambda)$は，4枚のリーマン面上にあり，$\lambda=0$から離れたところでは，いたるところ解析的である．新しい変数$z=-i(i\lambda)^{1/2}$と関数

$$f(z)=(i\lambda)^{1/4}I(\lambda)=\int_0^\infty dy\exp\left(-y^4+\frac{y^2}{z}\right)$$

を定義すると，$I(\lambda)$の特異点には2つの原因があることがわかる．1つは，4次の分枝点．もう1つは，関数$f(z)$にともなうもので，(13-17)式でとりあげたもののこと

である．

さて，これだけ準備をすませたので，経路積分

$$G(b,T;a)=\int_{(a,0)}^{(b,T)}dx(\tau)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^T\left[\frac{1}{2}\dot{x}^2-\frac{1}{2}\omega^2x^2-\frac{1}{4}\lambda x^4\right]d\tau\right\} \tag{13-21}$$

に戻ろう．変数変換 $y=x\sqrt{\lambda}$ によって，(13-21)式は，

$$G(b,T;a)=\int_{(a\sqrt{\lambda},0)}^{(b\sqrt{\lambda},T)}dy(\tau)\exp\left\{\frac{i}{\hbar\lambda}\int_0^T\left[\frac{1}{2}\dot{y}^2-\frac{1}{2}\omega^2y^2-\frac{1}{4}y^4\right]d\tau\right\} \tag{13-22}$$

と書き直される．$dy(\tau)$ にともなう規格化因子は，もちろん，通常の形$[m/2\pi i\hbar\varepsilon]^{1/2}$となるはずだが，$\hbar$ のかわりに $\lambda\hbar$ が含まれる．(13-22)式を見ると，(13-21)式の停留位相近似は，ただの$1/\hbar$ではなく，$1/\lambda\hbar$ の大きさのパラメータを含んでいる．したがって，われわれの当初の興味は $\lambda\to0$ であって，いわゆるWKBの $\hbar\to0$ ではなかったにもかかわらず，G のなかに $\lambda\hbar$ の積だけが含まれている事実のおかげで，結局，$\lambda\to0$ の極限を調べるのに，WKBの結果が使えるということがわかった．

つぎに，$\lambda\to0$ の極限でなにが起きるか，はっきりさせるために，(13-21)式に戻る．方程式

$$\ddot{x}+\omega^2x+\lambda x^3=0 \tag{13-23}$$

の解を，境界条件

$$x(0)=a, \qquad x(T)=b \tag{13-24}$$

の下で知りたい．ポテンシャルが固い壁をもつということは（$x\to\infty$ で急速に），$V(x)\to\infty$ 与えられた時間 T に対してたくさんの古典経路があるということだ．調和振動子の経路に近いもののほかに，遠くの x までいって，すばやく返ってくる高エネルギーの複数の軌道がある．古典経路を $\bar{x}_\alpha$ でラベルしよう．すると，

$$G\sim\sum_\alpha\sqrt{\frac{\partial^2S_\alpha}{\partial b\,\partial a}}\;e^{iS_\alpha/\hbar}, \qquad S_\alpha\equiv S(\bar{x}_\alpha) \tag{13-25}$$

と書くことができる．

(13-25)式のうちで，調和振動子の経路に近いものからの項は，普通われわれが摂動論とよんでいるものである．これは，(13-21)式を λ のべきで展開するとわかる．すなわち，

$$G \sim \int dx(\tau) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int \left[\tfrac{1}{2}\dot{x}^2 - \tfrac{1}{2}\omega^2 x^2 \right] d\tau \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\lambda}{4\hbar} \right)^n \left[\int_0^T x^4(\tau) d\tau \right]^n \tag{13-26}$$

$n=0$ の項は，摂動論のところで G_0 とよんでいたものだし，高次の n の項に対するファインマンダイアグラムの書き下し方もすでに見ている．しかし，G_0 は，$(a, 0)$ から (b, T) への調和振動子の経路を見るだけで得られる．WKB近似は，調和振動子については厳密解なのだから．

ここで問題は，調和振動子からかなり離れたほかの経路が，G にどのぐらい効くかということだ．これらの経路の作用積分を求めるために，関数 $S_\alpha(x, t; a)$ ［$(a, 0)$ から (x, t) への古典経路 x_α に沿った作用積分］のためのハミルトン - ヤコビ方程式を考える．S は，

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \tfrac{1}{2}\omega^2 x^2 + \tfrac{1}{4}\lambda x^4 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{13-27}$$

を満たす．古典経路では，$\partial S/\partial t$ はエネルギーがらみで定数，つまり，

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E \tag{13-28}$$

さらに，時間によらず，E は

$$E = \tfrac{1}{2}\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2}\omega^2 x^2 + \tfrac{1}{4}\lambda x^4 \tag{13-29}$$

である．粒子が到達しうる x の最大の値を，M とせよ．その点においては，$\dot{x}=0$ だから，

$$E = \tfrac{1}{2}\omega^2 M^2 + \tfrac{1}{4}\lambda M^4 \tag{13-30}$$

となる．われわれの問題で与えられているのは，a, b と T であって，E ではない．(13-29) 式は，E と T を関係づけるのに使われる．つまり，いつものように，

$$T = \int_a^b dx \left[2(E - V(x)) \right]^{-1/2} \tag{13-31}$$

$$V(x) = \tfrac{1}{2}\omega^2 x^2 + \tfrac{1}{4}\lambda x^4 \tag{13-32}$$

である．(13-31) 式の積分は，粒子が $x = \pm M$ へ何回も到達する場合には注意を要する．特に，もし $a=b=0$ なら，

$$T=2n\int_0^M dx\left[2(E-V)\right]^{-1/2} \tag{13-33}$$

である．ここで，nは，ターニングポイント($\pm M$)に到達する総回数である．作用積分Sに対して，(13-27)式は同様の楕円積分を与える．再び，$a=b=0$の場合について見ると，

$$T=\frac{2n}{M\sqrt{\lambda}}\int_0^1\frac{du}{\sqrt{1-u^4+(2\omega^2/\lambda M^2)(1-u^2)}}$$

$$S=2nM^3\sqrt{\lambda}\int_0^1 du\sqrt{1-u^4+(2\omega^2/\lambda M^2)(1-u^2)} \tag{13-34}$$

となる．SのTに対する依存性は，Mを通して間接的に入ってくる．これらの式にたくさんの解があるということは，多くの古典経路があるということの反映である．大きな振幅をもつ経路における，Sのλに対する依存性を知りたい．そういう経路では，4次の項が2次の項に勝り，(13-34)式の被積分関数のうちω^2を含む項は無視することができる．この仮定に矛盾がないか，求めるMが本当に

$$\tfrac{1}{4}\lambda M^4\gg\tfrac{1}{2}\omega^2M^2 \tag{13-35}$$

を満たすか，のちほど調べることにする．(13-34)式で$\omega^2/\lambda M^2$が無視されると，T^3SがMに依存しなくなり，ある定数Kをとって，

$$S=\frac{n^4K}{\lambda T^3} \tag{13-36}$$

とすることができる．Sはλの逆数に比例するため，(13-21)式のグリーン関数が$\lambda=0$に特異点をもつことに注意されたい．MをTで置きかえて(13-35)式を調べてみよう．$\omega^2/\lambda M^2$を無視した(13-34)式を使って（これがわれわれの求めている自己無矛盾性である），

$$M=\frac{nc}{T\sqrt{\lambda}}\qquad c=\text{定数} \tag{13-37}$$

を得るので，(13-35)式は

$$n^2c'\gg\omega^2T^2,\qquad c'=\text{定数} \tag{13-38}$$

となる．(13-35)式は，したがって，λが大きいから成立するというのではなく，十分小さいTに対して成立しているのである．さらに，何回（n回）も行ったり来たりする経路をとることにより，(13-35)式がいくらでも精度よくなりたつようにすることができる．

グリーン関数の特異点の起源の問題は，古い話である：λの符号を変えると束縛状態が存在しなくなるのだから，λで摂動展開しても収束するとは期待できない．それゆえ，エネルギーについては，λのべき級数は存在しないに違いない[脚注(1)]．

それなら，どうして摂動論がそんなによくて，また，どんなときにだめになるのだろうか．$G(t)$のフーリエ変換$\tilde{G}(E)$を考えよう（7章を見よ）．つまり

$$\tilde{G}(E)=\int_0^{\infty} e^{i(E+i\varepsilon)t/\hbar} G(t)\,dt, \qquad \varepsilon>0, \varepsilon\to 0 \tag{13-39}$$

である．われわれは，Gは$\exp(iS(x_\alpha)/\hbar)$の和であり，一方，おのおのの$S(x_\alpha)$は$S_\alpha(b, t\,; a)$の関数であることをすでに知っている．(13-39)式を計算するために，tの積分に停留位相法を使う．Gに$\exp(iS_\alpha/\hbar)$を代入し，(13-39)式の指数関数のなかでtについての微分がゼロになることを要請すると，

$$E+\frac{\partial S_\alpha}{\partial t}=0 \tag{13-40}$$

を得る［(13-28)式参照］．与えられたE［つまり，$\tilde{G}(E)$を調べるときに選んだエネルギー］に対して，積分(13-39)式に最大の寄与をなすtが選ばれる．端点を$a=0$および$b=0$とし，TをEの関数と考える．Eが小さければ，非調和項は，大振幅の経路には関係なく，小さい振幅の経路（調和振子の経路を近似する）に影響があるだけである．結果として，小さいEには，特異点の効果はない．

対照的に，大きいEでは，(13-39)式の積分のなかで，大きい振幅の経路が正のtの実軸上で停留位相点を与える．このときには，摂動論はだめになると予想される．停留位相点の位置は，大振幅の経路に使った以前の結果から推測できて，

$$\begin{aligned} E &\sim \tfrac{1}{4}\lambda M^4 \\ T &\sim \frac{n}{M\sqrt{\lambda}} \end{aligned} \tag{13-41}$$

である．したがって

脚注(1)　一方，べき展開が可能であるという“期待”は，Simonによってフォーク定理とよばれるものである（章末文献参照）．彼は，$H(\lambda)=p^2-(1/r)+\lambda(1/r)$を例として（このエネルギーは$E_n(\lambda)=E_n(0)(\lambda^2-2\lambda+1)$，この“期待”が正しくないことを示した．$\lambda>1$のとき，束縛状態は存在しないが，$E_n(\lambda)$に対する3項からなるべき級数は，完全に“健康”である．(13-17)式以降で述べたDysonの議論は，同様の論拠で批判を受けた．このような反例にもかかわらず，フォーク定理は直観的にアピールするものをもっており，かなり広い領域で正しいようだ．また，この定理は，信念のよりどころとしてはふさわしくはないが，推論する力を育てるという意味では，教育的だと思う．

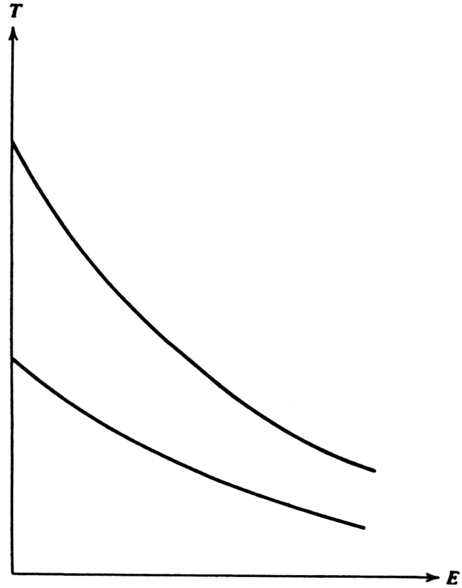


図13-1　2つの固定された端点を移動するのに要する時間を，エネルギーの関数として表わした曲線．ターニングポイントを1個と2個もつ経路群を表わす．

$$T=\frac{c''n}{\lambda^{1/4}E^{1/4}} \qquad c''=\text{定数} \tag{13-42}$$

となる．

(13-39)式のような積分の停留位相点，つまり(13-40)式の解を捜すには，TをEの関数としてプロットするとよい．T-E平面の解曲線は，ターニングポイントを同じ数だけもつ経路の集合である．図13-1では，ターニングポイントを1個と2個をもつ軌跡からなる曲線の例を示した．(13-40)式を解くには，図13-1で与えられたEの点で垂線を引く．(13-42)式が正しい領域より低いEでは，調和振動子の解に近い解が期待される．$G(t)$を計算する際，図13-1に引く曲線が右側で水平線に近づくと，大きいEでは困ったことが起きる．Tが大きくなると，右側へ十分行けば無限個の（いくらでも大きいnの）経路と交差することになる．これには，ポテンシャル$(1/4)\lambda x^4$が深く影響している．

演習：　12章$T(E)$で考えたポテンシャル($V(x)=\lambda e^x$)を含むいろいろなポテンシャルに対して，$T(E)$の曲線を引け．この曲線のどの性質が系の焦点を決めているか（すなわち，与えられたTに対して，始点と終点を共役ならしめているか)．

最後に，複素スケーリング法がエネルギーの解析接続にも使えることを述べておく．(13-11)式のラグランジアンのハミルトニアンは，

$$H=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}\omega^2x^2+\frac{1}{4}\lambda x^4 \tag{13-43}$$

である．その固有値を

$$E_n(\omega^2,\lambda)\qquad n=0,1,\dots \tag{13-44}$$

としよう．正で実のλに対しては，これは原点近傍でω^2の解析関数である．分岐点は，ω^2が十分大きく，かつ，実軸から遠く離れていて状態間交差が起きるときに現われる．変数変換$x\to x/\alpha$によって，Hは

$$H\to\frac{1}{\alpha^2}\left[\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}\alpha^4\omega^2x^2+\frac{1}{4}\lambda\alpha^6x^4\right] \tag{13-45}$$

と変換される．実のαでは，このスケール変換はユニタリーで，エネルギーは変わらない．(13-43)式から(13-45)式までから，αに関する恒等式

$$E_n(\omega^2,\lambda)=\frac{1}{\alpha^2}E_n(\alpha^4\omega^2,\alpha^6\lambda) \tag{13-46}$$

が成立する．これが力を発揮する理由は，離散エネルギー順位については，複素αでもこの恒等式が依然として正しいということである［一方，連続スペクトルの方は，シフトする．この問題および，(13-46)式の厳密な成立条件については立ちいらない］．$\alpha=\lambda^{-1/6}$とすると，

$$E_n(\omega^2,\lambda)=\lambda^{-1/3}E_n(\omega^2\lambda^{-2/3},1) \tag{13-47}$$

を得る．こうして，E_nについて3枚のシート状の構造が現われ，λの原点のある近傍の外側（つまり，十分小さい$|\omega^2\lambda^{-2/3}|$で）E_nは，解析的である．

前に複素スケーリングを積分E_nに適用して見つけたように，この方法は，特異点の一部を説明する上で役に立つ．しかし，ここでも，まだかなりの特異性が残っている．3枚のシート構造のほかに，複素スケーリング法は$\lambda=0$における$E_n(\omega^2,\lambda)$の特異点を変換して，大きなzにおける$E_n(z,1)$の特異点に移す．点∞における特異点は孤立特異点ではありえず，それに接近してくるほかの無限個の特異点が存在す

る．おそらく，これらが，われわれの最急降下法で現われたものなのである．

ノート

ヴァン・ブレック行列式とその経路積分での扱いについては，次の論文を見よ．

J. H. VanVleck, *Proc. Nat. Acad. U. S. Sci.* **14**, 178 (1928)

C. Morette (DeWitt), On the definition and approximation of Feynman's path integrals, *Phys. Rev.* **81**, 848 (1952)

W. Pauli, "Feldquantisierung," lecture notes, Zurich, 1951, published as Vol.6, *Pauli Lectures on Physics, Selected Topics in Field Quantization*, C. P. Enz, Ed., MIT Press, Cambridge, Mass., 1973

B. DeWitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957)

本文で述べたように，無限次元行列式（すなわち，$\delta^2 S$）を微分方程式（ここではヤコビ方程式）に関係づけることの証明としてはいくつか存在する．6章のn次元版の証明は，

G. J. Papadopou is, *Phys. Rev.* D**11**, 2870 (1975)

にある．別種の証明は，

S. Levit and U.Smilansky, *Proc. Amer. Math. Soc.* **65**, 299 (1977)

に見られる．複素スケーリングを使った証明は，

S. Coleman, The Uses of Instantons, in *The Whys of Subnuclear Physics,* Erice 1977, A. Zichichi, Ed., Plenum, New York, 1979.

の付録に与えれている．高次の微分方程式への一般化は

T. Dreyfus and H. Dym, *Duke Math.* J. **45**, 15 (1978)

にある．ウイーナー積分の漸近近似は，

M. Schilder, *Trans. Amer. Math. Soc.* **125**, 63 (1966)

S. R. S. Varadhan, *Comm. Pure and Appl. Math.* **19**, 261 (1966)

が発展させた．本章での非調和振動子のとり扱いは，

C. S. Lam, *Nuovo Cimento* **47A**, 451 (1966) ; **50A**, 504 (1967)

のものにしたがった．QEDの摂動展開に関するDysonの論文は，

F. Dyson, *Phys. Rev.* **85**, 631 (1952)

である．図13-1の図解法は，

D. W. McLaughlin, *J. Math. Phys.* **13**, 1099 (1972)

で使われた．複素スケーリング法を非調和振動子に応用発展させたのは，

B. Simon, *Ann. Phys.* **58**, 76 (1970)

である．非調和振動子への摂動展開が発散することは，

W. M. Frank, *J. Math.* Phys. **8**, 1121 (1967)

に示された．いろいろな関数に現われる本質的な特異点の存在を検知する方法に関して注意すべきことは，exp(ic/λ) の項が現われることが，厳密な定義による本質的特異点とは限らないということである．むしろ，この項は切断を横切る際の不連続性から現われるかもしれない．最近の物理では，この語の乱用はある程度見逃されている．

14章　WKB近似の詳細

この章では，WKB近似について，どの部分が実行可能で，どこに真のプロパゲータとのギャップが残るのかに注意をはらいながら，もう少し詳しく見ていく．6章でやった計算をある程度精密にする作業を続ける．ただし，ここでは2次ではないラグランジアンを許すことと，それを，2次のそれで置きかえることが正当化できるかどうか試みる．また，この章に引き続いて，プロパゲータの作用積分の2次変分がゼロになる領域，すなわちコースティクスを扱うが，本章で新たに出てくる記号や方法は，そのときの準備を兼ねている．

有限のメッシュ上で定義されたGを考え，メッシュサイズをゼロ極限にする．

以下のように

$$G^{(N)}(b,T;a)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2}\int dx_1\cdots dx_N\exp\left[\frac{iS^{(N)}(x_1,\ldots,x_N)}{\hbar}\right] \quad (14\text{-}1)$$

$$S^{(N)}(x_1,\ldots,x_N)=\sum_{j=0}^{N}\varepsilon\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2-V(x_j)\right] \quad (14\text{-}2)$$

を定義する．ただし，

$$x_{N+1}=b,\quad x_0=a,\quad \varepsilon=\frac{T}{N+1} \quad (14\text{-}3)$$

前に見たように，

$$G(b,T;a)=\lim_{N\to\infty}G^{(N)}(b,T;a)$$

これらの，n次元への拡張もすでに調べた（$\mathbf{x}$がn次元ベクトルとなる）．本章では，しばしば多次元版の形で定式化する．

与えられたNに対して，変数x_1, ..., x_Nについて停留位相近似を行い，$\hbar\to 0$でのGの主要項を求めたい．停留位相条件

$$\frac{\partial S^{(N)}}{\partial x_i}=0 \qquad i=1,\ldots,N \quad (14\text{-}4)$$

から，差分方程式

$$m\left(\frac{x_{i+1}-2x_i+x_{i-1}}{\varepsilon^2}\right)=-\frac{\partial V(x_i)}{\partial x}\qquad i=1,\ldots,N \tag{14-5}$$

が導かれる．これは，明らかに，連続問題のオイラー - ラグランジュ方程式に対する差分近似である．13章でやった発見法的な証明をまねて，そのまわりで展開すべき停留経路を取りあげるとすれば，それは，厳密な古典軌道ではなく，(14-5)式の解ということになる．(14-5)式の解を$\bar{x}_i$, $i=1$, ..., Nとする（とりあえず，重根の存在を無視する）．いつものように，Sを$\bar{x}$のまわりで展開するが，そのために

$$y_i=x_i-\bar{x}_i\qquad (y_0=0,\ y_{N+1}=0) \tag{14-6}$$

とする．この展開は，Vがなめらかであることを前提にしている．展開を，

$$S^{(N)}(x)=S^{(N)}(\bar{x}+y)=\bar{S}^{(N)}+\delta S+\tfrac{1}{2}\delta^2 S+\sum_{k=3}^{\infty}\frac{1}{k!}\delta^k S \tag{14-7}$$

と書く．項$\bar{S}^{(N)}$は$S^{(N)}(\bar{x})$のことで，$N\to\infty$で古典経路に沿った作用積分になる．1次変分は，$\bar{x}_i$, $i=1$, ..., Nが(14-5)式を満たすので恒等的にゼロ（εについて，それより高次の項は無視していない）．もし，厳密な古典経路を使っていたとしたら，この段階でその誤差を心配していなければならないところだった．$\delta S=0$を証明する際，有限メッシュでは，オイラー - ラグランジュ方程式を導くのに出くわす部分積分は，ここでは，$y_0=y_{N+1}=0$という事実を使って和の変数の置きかえに変わるだけ．つぎの項は，

$$\delta^2 S[y]=\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2\varepsilon}(y_{j+1}-y_j)^2-\varepsilon W_j y_j^2\right] \tag{14-8}$$

で，ここで

$$W_j=\frac{\partial^2 V(\bar{x}_j)}{\partial x^2} \tag{14-9}$$

n次元空間では，Wは行列で，$\delta^2 S$へは，

$$-\varepsilon\sum_{j=0}^{N}\sum_{\alpha,\beta=1}^{n}\frac{\partial^2 V(\mathbf{x}_j)}{\partial x_\alpha\partial x_\beta}y_{j\alpha}y_{j\beta} \tag{14-10}$$

の形で含まれる．最後に，Sの高次の項は，

$$\delta^m S[y]=-\varepsilon\sum_{j=0}^{N}\frac{\partial^m V(\bar{x}_j)}{\partial x^m}y_j^m \tag{14-11}$$

である（ただし，対応する次元への処理を施すこと）．

2次のラグランジアンに対する結果の連想から，$\delta^2 S$の対角化を行なうと，その固有値から行列式が直接出てくることが期待される．量y_i, $i=1, \ldots, N$を列ベクトルηで表わし，行列σを6章で扱ったのと同様に

$$\sigma=\frac{m}{2\varepsilon^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & & & \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & & \bigcirc \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & -1 \\ & \bigcirc & & & & & \\ & & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix} W_1 & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & W_N \end{pmatrix} \tag{14-12}$$

で定義する．すると，

$$\tfrac{1}{2}\delta^2 S[y]=\varepsilon\eta^T\sigma\eta \tag{14-13}$$

と表わせる．ただしTは，転置を表わす．6章では，σの行列式を求めることまでで留めたが，ここではもう少し詳しく調べ，その対角化も考えよう．

まず，ヤコビ行列，すなわち

$$A=\begin{pmatrix} a & b & & & \bigcirc \\ c & a & b & & \\ & c & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b \\ \bigcirc & & & c & a \end{pmatrix} \qquad N\times N \tag{14-14}$$

の形の行列についてよく知られている結果を引用しよう．固有値は，

$$\lambda_k=a-2\sqrt{bc}\cos k\theta, \qquad k=1,\ldots,N, \quad \theta=\frac{\pi}{N+1} \tag{14-15}$$

で，一方，k番目の固有関数は，

$$(\alpha_k)_j=\text{const.}\cdot\left(\frac{c}{b}\right)^{(j-1)/2}\sin(jk\theta) \tag{14-16}$$

である．われわれの$a=2$, $b=c=-1$に対しては，これらの値は，

$$\lambda_k=4\sin^2\left(\frac{k\theta}{2}\right) \tag{14-17}$$

$$(\alpha_k)_j=\sqrt{\frac{2}{N+1}}\,\sin(jk\theta) \tag{14-18}$$

である．σに対する固有値問題

$$\sigma\xi=l\xi \tag{14-19}$$

は，(12-19)式のステュルム‐リウヴィル問題の離散形をなしている．しかし，(14-19)式の方は，実対称の$N\times N$行列の固有値問題であって，N個の固有値と固有関数が存在することは，自明である．それらをつぎのように順序づける，

$$\begin{gathered} l_i,\xi_i \qquad i=1,\dots,N \\ l_1<l_2<\cdots<l_N \end{gathered} \tag{14-20}$$

ここで，ξ_iは$(\xi_i)_j$, $j=1$, …, Nの成分をもつ列ベクトルである．

ポテンシャルの影響が小さくなるような十分大きなjに対しては（しかし，jはNのオーダーとは限らない），lは(14-17)式のλに単純に関係していて，主な差といえば，σの定義のなかのεによるNの（2乗の）程度の大きさがかかることでぐらいである．こうして，

$$l_j=\frac{2m}{\varepsilon^2}\sin^2\left(\frac{j\theta}{2}\right)+(\ W\text{による誤差}\ ) \qquad \theta=\frac{\pi}{N+1},\quad \varepsilon=\frac{T}{N+1} \tag{14-21}$$

と書くことができる．大きいけれども，しかしNにくらべれば小さいjに対しては，

$$l_j\sim\frac{m}{2T^2}j^2\pi^2 \tag{14-22}$$

がなりたつ．これは，無限に深い井戸のシュレーディンガー方程式を思いださせる形をしている．ξ'は，$N\to\infty$の極限で規格直交化されるように

$$\varepsilon\xi_i^T\xi_k=\varepsilon\sum_{j=1}^{N}(\xi_i)_j(\xi_k)_j=\delta_{ik} \tag{14-23}$$

としてある［(14-18)式と比較せよ．おのおのの$(\xi_i)_j$は$O(1)$に注意］．Xを，その(i,j)成分X_{ij}が$(\xi_j)_i$となる$N\times N$行列とせよ．Xは$XX^T=X^TX=1/\varepsilon$を満たす．どんなベクトルηも$\{\xi_i\}$で展開できて

$$\eta_i=\sum_{j=1}^{N}(\xi_j)_i c_j \quad \text{つまり} \quad \eta=Xc \tag{14-24}$$

と書くことができる．2番目の等式のc_iは列ベクトル．(14-24)式から，パーシバル(Parseval)の関係式は，

$$\varepsilon\eta^T\eta = c^T c \tag{14-25}$$

の形をとる（下つき添字のiは，$N\to\infty$の極限では連続となる変数の上を走る．よって，εがη_iについての和に現われるように記号が定義されている．cの下つき添字の方は固有状態を指定するが，$t=0$とTで「無限ポテンシャル」になっているおかげで離散化されたままである）．$\delta^2 S[y]$は，簡単な形に表わせて，

$$\tfrac{1}{2}\delta^2 S = \varepsilon\eta^T\sigma\eta = \varepsilon c^T X^T\sigma X c = \sum_{j=1}^{N} c_j^2 l_j \tag{14-26}$$

となる．高次の変分，$\delta^3 S$等は同様にcを使って書くことができる．たとえば，

$$\delta^3 S = -\sum_{p,q,r} c_p c_q c_r\left[\varepsilon\sum_j \frac{\partial^3 V(\bar{x}_j)}{\partial x^3}(\xi_p)_j(\xi_q)_j(\xi_r)_j\right] \tag{14-27}$$

積分変数を$dy_1\cdots dy_N = d(\eta)_1\cdots d(\eta)_N$から$dc_1\cdots dc_N$に変更するのは簡単で，変換のヤコビアンとして$\varepsilon$を含む項が出てくるだけである．すなわち，

$$\frac{\partial(\eta_1\cdots\eta_N)}{\partial(c_1\cdots c_N)} = |\det X| = \sqrt{\det(X^T X)} = \sqrt{\det(1/\varepsilon)} = \varepsilon^{-N/2} \tag{14-28}$$

結局，グリーン関数は，

$$G^{(N)}(b\ \ T;a) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{(N+1)/2}\varepsilon^{-N-1/2}\exp\left(\frac{i\bar{S}^{(N)}}{\hbar}\right) \times\int dc_1,\cdots dc_N \exp\left[\frac{i}{h}\sum l_i c_i^2 + \frac{i}{\hbar}\sum_{m=3}^{\infty}\frac{1}{m!}\delta^m S\right] \tag{14-29}$$

のようになる．

この段階で，停留位相近似がなにをしたことに対応するのかが明らかである．つまり，$\delta^m S\,(m\geqslant 3)$を無視したのである．これが正しいとするとなにが起きるのか，手短かに思いだしておこう．2次までで打ち切られたプロパゲータは，

$$G_2^{(N)}(b,T;a) \equiv \left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{(N+1)/2}\varepsilon^{-N-1/2} \times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\bar{S}^{(N)}\right]\int dc_1\cdots dc_N \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum l_i c_i^2\right) \tag{14-30}$$

だから，ガウス積分を実行すると，

$$G_2^{(N)}(b,T;a)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{(N+1)/2}\varepsilon^{-N-1/2}e^{i\bar{S}^{(N)}/\hbar}\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{\pi i\hbar}{l_k}\right)^{1/2} \tag{14-31}$$

となる．これが$N\to\infty$の極限でどうなるかは，6章ですでに学んだ．$\Pi l_k=\det\sigma$だから，特に，

$$G_2^{(N)}(b,T;a)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar f(T)}}\ e^{iS(\bar{x})/\hbar} \tag{14-32}$$

である．ここで，$\bar{x}$は，$N\to\infty$の極限で$\bar{x}_k$から生じる古典経路．fは，

$$m\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}+W(t)f(t)=0,\quad f(0)=0,\quad \frac{\partial f(0)}{\partial t}=1 \tag{14-33}$$

を満たす関数．この式で，$W(t)$はW_kの極限．

高次項$\delta^m S[y]$, $m>3$に戻ろう．われわれが見ているのは，経路積分であって，ウイーナー積分ではないのだから，停留位相近似こそが正しい方法であることは事実である．しかし以下に，高次の項を落してもよいという議論をするなかで，「ここにはウイーナー積分という比較的簡単な問題であって，それについてはラプラス法が正しいものとしよう」というようないき方を装うつもりである．そういうわけで，もう一度，

$$G^{(N)}=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{(N+1)/2}\varepsilon^{-N-1/2}\int dc_1\cdots dc_N$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{\mu}\sum l_i c_i^2+\frac{1}{6\mu}\sum_{j_1j_2j_3}U_{j_1j_2j_3}c_{j_1}c_{j_2}c_{j_3}+\cdots\right] \tag{14-34}$$

を考えよう．ここで，

$$U_{j_1j_2j_3}=-\varepsilon\sum_k\frac{\partial^3 V(\bar{x}_k)}{\partial x^3}(\xi_{j_1})_k(\xi_{j_2})_k(\xi_{j_3})_k \tag{14-35}$$

また，μは$(i\hbar)$を置き直したものであるが，実の正値で，その$\mu\to 0$における漸近極限を調べたい．

われわれの目的は，11章で行なった議論の一般化である．そこでは，$f(x)=x^2\mathrm{o}(1)$に対して，関数

$$F(\lambda)=2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\ \int_0^\infty e^{-\lambda(x^2+f(x))}dx \tag{14-36}$$

は，$\lambda\to\infty$ の極限で1に漸近したのだった．実際，

$$\tfrac{1}{2}(1-F(\lambda))\leqslant\Delta_1+\Delta_2$$

$$\Delta_1\leqslant\lambda a^2\eta(a)\quad ただし\quad \eta(a)=\frac{1}{a^2}\max_{0<x<a}f(x)$$

$$\Delta_2\leqslant\frac{e^{-\lambda a^2}}{\sqrt{2\pi\lambda a^2}} \tag{14-37}$$

という評価をした．ここで，a は，0から∞までの積分を$(0, a)$と(a, ∞)の2つの部分に分けたときに導入された．a を $a=(\log\ \lambda)/\sqrt{\lambda}$ のようにうまく選ぶと，$F\to1$ がでてくる（η は，十分速くゼロに近づくものと仮定した）．

(14-34)式の$G^{(N)}$が，μの最初のオーダーで(14-30)式の$G_2{}^{(N)}$になることを示すには，(14-36)式のような積分がN個あるなかで，個々の誤差をコントロールするだけではなく，すべての誤差の和がμと一緒にゼロにいくことをも示さなければならない．

したがって，つぎの量

$$F(u)=\frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}dc_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dc_N\exp\left(\frac{-1}{\mu}\sum c_i^2l_i+\frac{1}{6\mu}\sum c_ic_jc_kU_{ijk}+\cdots\right)}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}dc_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dc_N\exp\left(\frac{-1}{\mu}\sum c_i^2l_i\right)} \tag{14-38}$$

が，$\mu\to0$ で1に近づくことを示したい．分子のなかのドット記号は$\delta^mS\,(m\geqslant4)$を表わす．11章と同様に，問題を2つに分ける．まず，十分大きなa_iに対しては，積分を$|c_i|\leqslant a_i$で打ち切っても漸近極限は変わらないことを見る．つぎに，a_iを大きすぎないようにとれば，3次以上の項は2次の項より圧倒的に小さくなることを示す．

1つ1つの積分がa_iで打ち切られているとしよう．その誤差は，（いつものように，$|c_i|\leqslant a_i$がうまく収束すると仮定して）

$$\Delta_2=\sum_i\frac{\exp(-l_ia_i^2/\mu)}{\sqrt{l_ia_i^2/\mu}} \tag{14-39}$$

である．11章と同じように，a_iを $\sqrt{\mu/l_i}$ と同じようにゼロに近づければほぼよいのであるが，Δ_2を必ずゼロにいかせるためには，a_iは少しだけゆっくりとゼロに近づかなければならない．

もう1つの問題は，$|c_i|\leqslant a_i$, i, …, Nのなかで，2次の項が高次項よりもはるかに大きく，高次項が実際1よりも小さいことを保証することである．ここでは，最悪のケ

ース，すなわち，3次の項だけを見ることにする．ここでも，誤差は本質的に

$$\Delta_1 \leqslant \max_{|c_i|\leqslant a_i} \frac{1}{\mu} \sum c_i c_j c_k U_{ijk} \leqslant \frac{1}{\mu} \sum a_i a_j a_k |U_{ijk}| \tag{14-40}$$

である．Uは，古典経路に沿って評価した関数$\partial^3 V/\partial x^3$のフーリエ成分．$i$，$j$，$k$が増加するにつれ，フーリエ成分としての値が減少していくことは，$\partial^3 V/\partial x^3$のなめらかさによってリーマン‐ルベーグ(Riemann-Lebesgue)の補題から決まる．そこで，

$$|U_{jkl}| \leqslant \frac{\kappa}{jkl} \tag{14-41}$$

を満たすκが存在すると仮定しよう．Vが高次の微分をもてば，この仮定は正しいが，その詳細な条件には立ち入らないことにする（1つだけ注意：関数Vの変数は古典経路であって，ブラウン運動とは違って一般になめらかである．したがって，下つき添字の大きさが増加するにつれて$|U_{ijk}|$の減少が遅くなるようなことはない）．よって，

$$\Delta_1 \leqslant \frac{1}{\mu} \sum_{jkl} \frac{\kappa a_j a_k a_l}{jkl} = \frac{\kappa}{\mu} \left(\sum_j \frac{a_j}{j} \right)^3 \tag{14-42}$$

a_jが$\sqrt{\mu/l_j}$にどのくらい近づくことができるか強調するために，

$$a_j = b_j \sqrt{\mu/l_j} \tag{14-43}$$

を定義する．そして，非常にゆっくり$b_j \to \infty$の極限をとることによって，収束が得られることを示す．

そうすると誤差は，

$$\Delta_1 + \Delta_2 \leqslant \sum_j \frac{e^{-b_j^2}}{b_j} + \kappa\sqrt{\mu} \left[\sum \frac{b_j}{j\sqrt{l_j}} \right]^3 \tag{14-44}$$

と書くことができるから，

$$b_j = \left[\alpha \log\left(\frac{j}{\mu} \right) \right]^{1/2} \qquad \alpha > 1 \tag{14-45}$$

ととれば，誤差はμと一緒にゼロにいくことは明らかである．［大きなjに対して$l_j = \mathrm{O}(j^2)$を思いだせ］．不必要なくらい速いΔ_1の収束性は，(14-41)式を満たすためにVに課した過度の仮定のせいである．

以上示したことから，停留位相近似が，どんな困難を抱えこんでいるのかも理解できたと思う．純虚数のμを使った場合には，$\exp(-l_i a_i^2/\mu)$の項はΔ_2を小さくすることには役立たない．b_jは，Δ_2が収束するためには，jより速く無限大に近づかなけ

ればならないだろう．しかし，そのときは，Δ_1の方が発散する．したがって，証明は完全ではない．多分，複数の項からの位相が打ち消しあうことを使う必要があるだろう．さらに，純虚数の場合の証明は，G自身ではなくて，質のよいψの大きな集合に対する$G\psi$を使ったほうがうまくいくと思う．ψは，停留位相近似が頼みとする激しい振動が実際に打ち消しあうことを保証するから．半古典極限を得るためのHagedornの方法では，彼が定義したコヒーレント状態が，その能力から見て役に立つものと思う．

ノート

この章で扱った種類の漸近近似の数学的研究がいくつかある．ウイーナー積分については，

M. Schilder, *Trans. Amer. Math. Soc.* **125**, 63 (1966)

にある．これに関連して，

S. R. S. Varadhan, *Commun. Pure and Appl. Math.* **19**, 261 (1966)

では熱方程式の解が研究された．経路積分では，漸近近似はよりデリケートな停留位相近似の1つの拡張になっている．この問題は，

S. Albeverio and R. Hoegh-Krohn, *Inventions Math.* **40**, 59 (1977)

で研究されている．これは，同じ著者たちによる経路積分の定式化

S. Albeverio and R. Hoegh-Krohn, *Mathematical Theory of Feynman Path Integrals*, Lecture notes in Math 523, Springer, Berlin, 1976

に基づいている．トロッター公式に基づく半古典論の導出については，

G. A. Hagedorn, *Commun. Math. Phys.* **71**, 77 (1980)

を見よ．

15章　コースティクス近傍のWKB

ここまでWKB近似をやって明らかなように，(14-33)式の$f(t)$が$t=T$でゼロになるか，あるいは同じことだけれど，$\partial^2 S/\partial a \partial b$が無限大になると，興味深い問題が発生する．これは，離散的（有限のN）あるいは連続のいずれの場合でも，$\delta^2 S^{(N)}$（または$\delta^2 S$）の固有値の少なくとも1つがゼロになることに起因している．2次のラグランジアンの場合にも発散が現われたことが，目に焼きついているだろう．それは，完璧な焦点ができあがってしまって，グリーン関数がデルタ関数になったからだ．しかし，ここでは$\delta^3 S$の項が現われているので，発散は近似的な意味でしか生じない．事実，グリーン関数は有限である．

変数a，b，およびTを，その古典経路に沿って$\delta^2 S$の固有値の1つがゼロになるように選べ．すなわち，時刻0で点aを出た経路に対して，時刻Tで点bが共役になったとしよう．$(a, 0)$を固定したまま，bの近傍のグリーン関数$G(b+\Delta b, T; a)$を考える．ここでも，$G^{(N)}$が研究の対象であるが，離散問題の解$\bar{x}_k$とそれに対応する厳密な古典経路$\bar{x}(t)$との差は心配する必要はない．というのは，固有値の差は$O(\varepsilon)$程度しかないからである（実際，(14-12)式の固有値σは，ほんの$O(\varepsilon^2)$だけずれるにすぎない）．ここで行なう展開は，前にやったものとは異なる．経路のまわりで展開することは同じだが，その経路は$(a, 0)$から$(b+\Delta b, T)$にいたる古典経路ではなく，$\bar{x}$である．これは，変分経路が上限で消えないで，なにかよぶんの項をもつことを意味している．つぎに，$\rho(T)=\Delta b$; と$\rho(0)=0$を境界条件としてもつ任意の曲線の経路$\rho(t)$を定義する．ρは，つごうのよいように選べるようになっているが，ここでの目的のためには任意のまま残しておく．経路積分の「積分変数」$x(\tau)$を，

$$x=\bar{x}+\rho+y \tag{15-1}$$

のように書く．ただし，$y(0)=0$，$y(T)=0$．例によって，新しい積分変数$y(\tau)$への変換を使って展開を行なうと，

$$S(x)=S(\bar{x})+\delta S[\rho+y]+\tfrac{1}{2}\delta^2 S[\rho+y]+\sum_{m=3}^{\infty}\frac{1}{m!}\delta^m S[\rho+y] \tag{15-2}$$

と書き直される．ここでは，しかし，δSは消えない．つまり，

$$\delta S[\rho+y]=\delta S[\rho]=\left[\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{\bar{x}}\rho(t)\right]\Bigg|_0^T=\bar{p}(T)\Delta b \tag{15-3}$$

が残る．ただし，$\bar{p}$はTにおける$\bar{x}$の運動量．n次元の場合，(15-3)式の右辺は内積になる．2次の変分は，

$$\begin{aligned}\delta^2 S[\rho+y]&=\int_0^T dt\left[m(\dot{\rho}+\dot{y})^2-W(\rho+y)^2\right]\\&=\delta^2 S[\rho]+2\int_0^T(m\dot{\rho}\dot{y}-W\rho y)\,dt+\delta^2 S[y]\end{aligned} \tag{15-4}$$

（Wの定義については(14-9)式を見よ）

量$\delta^2 S[\rho]$は定数で，当面無視する．(15-4)式の交差項を部分積分すると，

$$\text{交差項}\ =\int_0^T(m\dot{\rho}\dot{y}-W\rho y)\,dt=m\rho\dot{y}|_0^T-\int_0^T(m\ddot{y}+Wy)\rho\,dt \tag{15-5}$$

となる．関数yはステュルム - リウヴィル方程式の固有関数と同じ境界条件をもつので（(12-9)式から(12-11)式の議論参照），それを使って

$$y(t)=\sum_j a_j\varphi_j(t) \tag{15-6}$$

と展開できる．固有値をλ_1, λ_2, …, とし，$\lambda_1<\lambda_2<\cdots$のように順序をつける．ここでも

$$\delta^2 S[y]=\sum_j \lambda_j a_j^2 \tag{15-7}$$

とできるが，いまは共役点を考えているから，$\lambda_1=0$．つまり，a_1^2は$\delta^2 S$に現われない．(15-5)式のほうも書きかえができて

$$\text{交差項}\ =m\sum a_j\,\Delta b\,\dot{\varphi}_j(T)+\sum\lambda_j a_j\int_0^T\varphi_j(t)\rho(t)\,dt \tag{15-8}$$

つぎに，変数を$\{a_i\}$から$\{y_i\}$に変更する．ただし，ヤコビアンの詳細については省略する．これは，いま扱っているのが$G^{(N)}$であるということをきちんと覚えていさえすれば，計算できるはずの量だからである．こうしてつぎの形のグリーン関数を得た．

$$G(b+\Delta b,T;a)=\int da_1\cdots da_N\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[S(\bar{x})+\bar{p}(T)\Delta b+\tfrac{1}{2}\delta^2 S[\rho]\right.\right.$$

$$+m\sum_j a_j\,\Delta b\,\dot{\varphi}_j(T)+\sum_j \lambda_j a_j\int_0^T \varphi_j(t)\rho(t)\,dt$$
$$+\frac{1}{2}\sum_j \lambda_j a_j^2+\sum_{m=3}^{\infty}\frac{1}{m!}\delta^m S[\rho+y]\Bigg]\Bigg\} \qquad (15\text{-}9)$$

この式で，新しく興味深いのは，指数関数の中からa_1^2が消えていて，$\Delta b=0$の場合には，a_1については3次の項から始まるということである．ただし，ここからその理論的結論を明確に引きだすためには，余分なもの，すなわち$N-1$個のa_2, …, a_N上の積分をきれいに処理しておかなければならない．これを実行するには2通りある．1つは，以前の経験を利用して，漸近極限において，それぞれの項にそれぞれの$\hbar$のべきを割りふるということをする．ただし，すべて矛盾なくことが運ぶには注意を要する．これをΔbが小さい場合にのみ応用する．2つ目は，カタストロフィー理論の一般的知識を利用して被積分関数の標準形を求め，小さいΔbの極限で，ユニフォーム近似の形に昇華させる方法である．これは16章で行なう．

1番目の方法では，積分(15-9)式で，指数関数の中の変数をaのべき級数とみなす．前章まででは，$O(a_ia_ja_k)/\hbar$を，2次の項にくらべて$O(\hbar^{3/2}/\hbar)=O(\hbar^{1/2})$だとして無視してきた．ここでは，$a_1^2$がない以上，それを見直さなければならない．

まず，a_1の大きさを評価する．つぎの積分

$$F_k(\mu)=\int \exp(i\mu x^3)x^k\,dx$$

を考えよう．スケール変換で，これは

$$F_k(\mu)=\mu^{-k/3}\mu^{-1/3}F_k(1)$$

となる（積分の極限は重要でないと仮定して）．したがって，個々のxのべきが$\mu^{-1/3}$の因子を出す．これから，$\hbar\to 0$のときに，a_1は$O(\hbar^{1/3})$のオーダーになると予想される．つぎに，Δbとρを考える．定義にしたがって，ρは$O(\rho)=O(\Delta b)$になるように選べる．Δbは，外から与えるパラメータで，好きなように選べる．いまは，グリーン関数の停留領域における記述だけを問題にしているのだから，$a_1\Delta b=0(\hbar)$となるΔbを考えておけば十分である．これは，a_1の積分への主な寄与が，a_1^3と$a_1\Delta b$からきているからだ．この2つの寄与が同じオーダーのときには，積分は，もはや3次の項だけに支配されるとはいえない（実際，係数が$\sim(\Delta b)^{1/2}$の2次の形で書き直すことができる）．よって，Gがほとんど特異点になっているこの停留領域は，$\Delta b\lesssim\hbar^{2/3}$で特徴づけられる．以下，この領域に研究を限定する．

$j\neq 1$のa_j^2は，最終的には積分$\int da_j\,(j\neq 1)$を支配するいつもの2次の項である．した

がって，普通の方法にしたがって$a_j=O(\hbar^{1/2})$ $(j\neq 1)$ととってよいと仮定する．

つぎに，a_j，$j\neq 1$の線形項と$\delta^k S$，$k\geqslant 3$に現われるすべてのa_jを含む高次項を評価しなければならない．線形項$a_j\Delta b$と$a_j\int\varphi\rho dt$，$j\neq 1$は，$a_j=O(\hbar^{1/2})$かつ$\Delta b=O(\hbar^{2/3})$だから，$\hbar$の最初のべきの項にはきかない．というわけで，これは支配的な寄与の2次の項a_j^2より$\hbar^{1/6}$だけ小さい．高次項としては，3次の変分だけを考える，つまり

$$\delta^3 S[\rho+y]=-\int_0^T dt\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}\bigg|\bigg[\rho(t)+\sum_j a_j\varphi_j(t)\bigg]^3 \tag{15-10}$$

この積分は，つぎの10種類の積分を含む：

I.	a_1^3	
II.	$a_1^2 a_j$	$j\neq 1$
III.	$a_1 a_j a_k$	$j, k\neq 1$
IV.	$a_j a_k a_n$	$j, k, n\neq 1$
V.	$a_1^2\int\rho$	
VI.	$a_1 a_j\int\rho$	$j\neq 1$
VII.	$a_j a_k\int\rho$	$j, k\neq 1$
VIII.	$a_1(\int\rho)^2$	
IX.	$a_j(\int\rho)^2$	$j\neq 1$
X.	$(\int\rho)^3$	

もちろん，$a_1{}^3$はa_1の積分にとって大切である．前に調べたように，それは$O(\hbar)$程度である．上の積分のリストの残りをずっとやっていくと，ほかの項はすべて$O(\hbar^{7/6})$の大きさであることがわかる．また，$\delta^k S$，$k\geqslant 4$の最悪の項は$O(\hbar^{4/3})$だということも明らかであり，考慮しなくてもよい．

以上から，$\hbar$の最低のオーダーで，グリーン関数は，

$$G(b+\Delta b, T; a)=\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[S(\bar{x})+\bar{p}(T)\Delta b]\right\}$$
$$\times\int da_1\ldots da_N\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{u}{3}a_1^3+va_1+\frac{1}{2}\sum_{j=2}^{N}\lambda_j a_j^2\right]\right\} \tag{15-11}$$

となる．ただし，

$$u=-\frac{1}{2}\int_0^T\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}[\varphi_1(t)]^3 dt \tag{15-12}$$

$$v=m\Delta b\,\dot{\varphi}_1(T) \tag{15-13}$$

$a_j\,(j\neq 1)$ の上の積分は，例によって$(\Pi'\lambda_j)^{-1/2}$．$j=1$ の項を含ませないことに注意するためにΠにプライムをつけた．すべてのλ_jを掛けたものが，ヤコビ方程式の解に関連した量$f(T)$を与えることを思いだして［6章または(14-32)式，(14-33)式参照］，$\Pi'\lambda_j=f(T)/\lambda_1$と書くことにする．共役点では$f(T)$と$\lambda_1$は両方ともゼロになるが，その比は有限である．実際，その比を見るだけで$\Pi'\lambda_j$を計算できることがある（そのような例が，インスタントンに関連して28章で出てくる）．

3次の多項式の積分が最終的に残った．ここで，エアリ(Airy)関数の定義

$$Ai(z)=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma \exp\left(tz-\tfrac{1}{3}t^3\right)dt \tag{15-14}$$

を思い起こそう．ただし，積分経路Γは，図15-1に与えたとおりである．この関数は，また

$$Ai(z)=\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3}+zs\right)ds \tag{15-14a}$$

とも書くことができる．エアリ関数の性質をいくつか紹介すると，

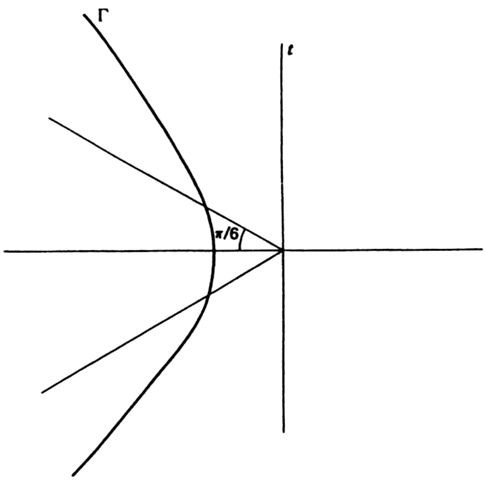


図15-1　(15-14)式のエアリ関数を評価するための，複素t平面上での積分路Γ．Γは左半面で無限遠にいき，π/6を越える角度では負の実軸を通る．

$$\frac{d^2Ai(z)}{dz^2}-zAi(z)=0$$

$$Ai(-z)=\frac{1}{3}\sqrt{z}\left[J_{1/3}\left(\tfrac{2}{3}z^{3/2}\right)+J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right)\right]$$

ただし，Jは，ベッセル関数．また，実のzに対して

$$Ai(z)=\begin{cases}\dfrac{1}{2\sqrt{\pi}\,z^{1/4}}e^{-(2/3)z^{3/2}}(1+O(z^{-3/2})), & z\to\infty\\ \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\,(-z)^{1/4}}\sin\left[\tfrac{2}{3}(-z)^{3/2}+\dfrac{\pi}{4}\right](1+O(|z|^{-3/2})), & z\to-\infty\end{cases} \tag{15-15}$$

を満たす．

3次の積分は，エアリ関数そのもので，(15-11)式と(15-14)式をくらべてみれば，Gが$Ai(vu^{-1/3}\hbar^{-2/3})$の因子をもつことはすぐわかる．$G$の最終形を得るには，ちょっとした「色直し」が必要である．$\bar{p}(T)$は，Tにおける$\bar{x}$に沿った運動量だから，$\partial S(\bar{x})/\partial x_{\mathrm{final}}$と書いてもよい．したがって，

$$S(\bar{x})+\bar{p}(T)\Delta b=S(\text{古典経路}\quad a\to b+\Delta b)\equiv S_c(b+\Delta b,T;a)$$

と書くことができる．以上から，$\hbar$の最低次で

$$G=\sqrt{\frac{\lambda_1}{f(T)}}\exp\left[\frac{iS_c(b+\Delta b,T;a)}{\hbar}\right]Ai\left(\frac{v}{u^{1/3}}\hbar^{-2/3}\right) \tag{15-16}$$

（因子πなどを別にして）と得られた．

(15-16)式は，$\Delta b\lesssim\hbar^{2/3}$(したがって$v\lesssim\hbar^{2/3}$)の条件を除いて導く16章の結果とたいして違わない．したがって，(15-16)式からGの定性的な情報を調べてみよう．極限$\hbar\to0$は，(15-14)式の$|z|$が無限大に行くことに対応する．したがって，(15-15)式から，（$\hbar\to0$における）Gの挙動が$v/u^{1/3}$の符号に強く依存することが示唆される．$v/u^{1/3}>0$では，グリーン関数は指数関数的に減衰する．すなわち，$\exp[-\text{定数}(\Delta b)^{3/2}]$の形でゼロに行く．一方，逆の符号の$v$に対しては，$G$はサイン関数的な依存性をもつ．$v/u^{1/3}$の符号を変えるということは，共役点を通過する際に$\Delta b$の符号を変えることと同じことである[(15-13)式参照]．こうして，共役点の片側は「陰」になる．グリーン関数，したがって系がそこに存在する確率は，小さい．その反対側は，明るく光る部分（輝点）で，系が見いだされる確率が大きい．もっとも「明るい」領域が，共役点のすぐ近傍である．そこでは，エアリ関数の漸近展開が使えない．たとえば，

$x=b(\Delta b=0)$ では

$$G \sim \int e^{iua_1^3/3\hbar} da_1 \sim \left(\frac{\hbar}{u}\right)^{1/3} \tag{15-17}$$

であるが，これは大きい．というのは，Gへの各自由度からの寄与は，典型的には，$\hbar^{1/3}$ではなく，$\hbar^{1/2}$のオーダーだから．したがって，共役点の近傍では，量子効果が強く現われて，それが$\hbar$の低いオーダーの項の出現に反映する．

ここまでは，1次元の変数で処理してきた．多次元だと，“v” が

$$v=m\Delta \mathbf{b}\cdot\dot{\boldsymbol{\varphi}}_1(T)$$

の形をもつ．ただし，$\boldsymbol{\varphi}_1(t)$はベクトル型のヤコビ方程式の解．一般的には，共役点からなる面が存在しえて，その面の片側は明るく，片一方は陰になる．このような面を，光学ではコースティクスとよんでいる（図15-2を見よ）．コースティクスについては，カタストロフィー理論との関係をも含めて，もっと説明していくが，とりあえず(15-16)式をもう少し詳しく見ておこう．

(15-16)式のGによって明らかになった現象，すなわち，共役点を横切る際に存在確率が高い点から低い点へと通過するということによって，新たな謎が出てきたわけではなく，むしろ，何度も何度もでてきてはそのたびごとに隠してきた古い問題に決着がつけられたことになる．半古典近似を使うときには，オイラー - ラグランジュ方程式の解としての古典軌道が1本1本十分離れていることをいつも仮定していた．いまここで導いたグリーン関数は，まさに，2本の古典軌道がくっつく場合をも正しく記述するものである．

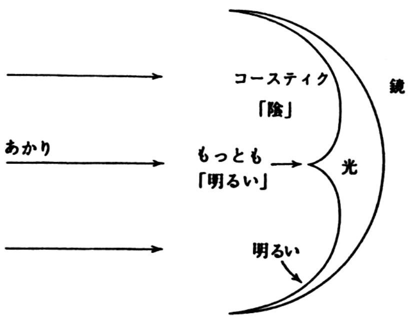


図15-2　観測されるコースティクの一般的な例 —— 円筒形の鏡の断面で見られるコースティク．あかりを適当に調節したとき，コーヒーカップの表面などでよく見られる．

本当にこれが正しいのかを調べるために，エアリ関数がどんな種類の問題を解いているのか寄り道してみよう．変数変換で

$$Ai(\alpha x^{2/3})=\frac{x^{1/3}}{2\pi i}\int_{\Gamma}\exp\left[x\left(\alpha y-\frac{1}{3}y^3\right)\right]dy \qquad (15\text{-}18)$$

と書き直す．ただし，$x>0$．αを固定したままxを大きくすると，(15-15)式の2つの形のいずれか一方が得られる．この2つの形は，(15-18)式に鞍点法を応用する際に現われる方程式

$$0=\frac{\partial}{\partial y}\left(\alpha y-\frac{1}{3}y^3\right)=\alpha-y^2$$

の処理から出てくる．$\alpha>0$では，積分経路Γ上（図15-1で虚軸に一致させる）には解が存在しない．一方，$\alpha<0$には，2つ解がある．$\alpha<0$だとAiの大きい方の値をとるが，一方このときには，積分は，積分範囲から離れた停留点から生ずる指数関数的に小さな項しかとらない．もし，αを変えて，特に$x^{-2/3}$のオーダーまで小さくできるとすると，この漸近近似は破綻する．「やっぱり，元のエアリ関数に戻ろう」とつぶやく程度のことにしかならない．もちろん，原因は，2つの停留値 $y=\pm\sqrt{-\alpha}$ がくっつくことにある．小さなαのときには，2つの積分への寄与が干渉しあって，Aiを2つの個別な項の和で書くのが不正確になる．一方，正のαに対しては，yはΓの上に解をもたないものの，その近くにいる．

経路積分では，停留値はδSのゼロ点で与えられる．また，与えられた初期点と時間Tに対して，（境界値問題としての）古典力学には，共役点の片側では2つの解があり，反対側には解がない．これを，厳密に見てみよう．(15-9)式の指数関数のなかは，ちょっと変った座標a_j, $j=1, \ldots, N$で表現されているが，古典作用積分そのものである．量$\bar{x}$, $\bar{p}$, φ_jなどは，固定されているから，$\delta S=0$を解くためには，それぞれのjに対して$\partial/\partial a_j$がゼロになることを要求すればよい．$j\neq 1$については，最初の2次の項$(1/2)\lambda_j a_j^2$の微分が1次方程式を与えるから，ゼロの近くにつねに解が存在する（小さなΔbで）．ところがa_1については，(15-11)式を参照すると，方程式は$\partial(ua_1^3/3+va_1)/\partial a_1=0$になるが，これは$v/u$ ($v\neq 0$)の符号によって，解を2個もつか1つももたないか，のいずれかになる．こうして，(15-16)式で見た現象は，2つの古典経路が接近するからである，ということがわかった．

ここまでの結果は，明らかに一般化することができる．（配位）空間の座標で(15-12)式のuがλ_1と同時にゼロになり，a_1の最初の項がa_1^4になるような領域があるとしよう．このとき，プロパゲータは

$$G(\mathbf{b}+\Delta\mathbf{b},T;\mathbf{a})=\exp\left(iS_c(\mathbf{b}+\Delta\mathbf{b},T;\mathbf{a})/\hbar\right)\int da_1\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{a_1^4}{4}+\frac{v_2a_1^2}{2}+v_1a_1\right)\right] \tag{15-19}$$

のかたちに表わせる．ただし，v_1とv_2は$\Delta\mathbf{b}$に依存し，$\Delta\mathbf{b}=0$のときにはゼロである．点$\mathbf{b}$は，前にも増して明るく輝く．さらに，点$\mathbf{b}$からある方向に，多項式

$$P(a_1)=\frac{1}{4}a_1^4+\frac{1}{2}v_2a_1^2+v_1a_1 \tag{15-20}$$

は，2次微分がゼロになるような停留点をもつ．つまり，変数をずらすことで，ふたたびコースティクを得るが，今度は，3次方程式でその挙動が決まるような，1つ次数の低いコースティクである．このコースティクの方程式をつくるには，$dP/da_1=d^2P/da_1^2=0$が同時に解けるような(v_1, v_2)の組みあわせを見つければよい．v_1とv_2の間に要求される条件は，

$$\frac{1}{27}v_2^3+\frac{1}{4}v_1^2=0 \tag{15-21}$$

であり，これはカタストロフィー理論でいうカスプ(cusp)である．v_1とv_2は$\Delta\mathbf{b}$の関数であり，v_1は$\dot{\boldsymbol{\varphi}}_1(T)$方向の座標，$v_2$はそれに直行する方向の座標になっている．こうして，このコースティクは，特殊な形，すなわちカスプを背景としていることがわかる．「非常に明るい点」とその近傍の様子は，図15-2を参照されたい．

ある点$\mathbf{b}$で，λ_1とλ_2がともにゼロになったとしよう．そのとき，Gは，二重積分を含むが，a_1とa_2の関数が，$\Delta\mathbf{b}\cdot\dot{\boldsymbol{\varphi}}_1(T)$および$\Delta\mathbf{b}\cdot\dot{\boldsymbol{\varphi}}_2(T)$に関係した係数をともなって現われるくるのは明らかである．それだけではなく，$\dot{\boldsymbol{\varphi}}_1(T)\times\dot{\boldsymbol{\varphi}}_2(T)$方向の$\Delta\mathbf{b}$の成分も$\delta^3S$の項によるコースティクができるかどうかを支配するであろう．プロパゲータは，したがって，

$$G\sim e^{iS_c/\hbar}\int da_1da_2e^{iP/\hbar} \tag{15-22}$$

のように書くことができるが，ここでのPは，

$$P(a_1,a_2)=a_1^3+a_2^3-xa_1-ya_2-za_1a_2 \tag{15-23}$$

の形にもっていくことができる．

こうして，コースティク近傍の波動関数を記述する関数のクラス全体を得ることができる．(15-20)式に示した種類の関数は，一般化されたエアリ関数とよばれる．もっと多変数の多項式をもつ(15-22)式のプロパゲータも，基本的に同じことである．

得られた描像は，つぎのとおりである．ある多項式［(15-23)式のような］が，大きなパラメータをともなって積分に現われることによって，コースティクスがとる関数形を支配してしまう．特に，その多項式の低次のいくつかの係数は，位置の関数になっている．したがって，コースティクスの位置は，多項式の1次微分と2次微分を同時にゼロにするような係数の値から，逆に決まってくる．

カタストロフィー理論を勉強したことがある人には，これらの結果から，コースティクスはカタストローフ以外のなにものでもないと断言できるであろう．この時点でカタストロフィー理論の説明に踏みこむのは，寄り道にすぎるのでしない．したがって，カタストロフィー理論に不案内な人には，以下の説明はわかりにくいかもしれない．

以上でやったことは，実際上カタストロフィー理論の原理をうまく応用した例である．ここでは，構造安定性の破れによって形態(morphology)の決定がなされた．ポテンシャルとして多項式 P を考え，それが構造安定でなくなるときの係数をさがすという形で，コースティクスの位置が決められる．さらに理論は，係数の空間から物理的な座標空間へと，写像を与える．コースティクスの形は，この写像の細かい点には依存しない．したがって，(15-21)式のカスプの例も，個々の値の問題という意味ではなく，特異点近傍の形という意味で，コースティクスの普遍的な種類の1つであると考えられる．

この章でした議論は，また，カタストロフィー理論の限界を知る上でもよい教訓になっている．構造安定が破れる点の位置は正しい（これがカタストロフィー理論が与える得ることのすべて）としても，（コースティクのまわりが他よりどのくらい明るいかとかいった）プロパゲータの中身は，現象の背景にある量子論のような理論を見なければわからない．

次章では，コースティクから少し離れた点のプロパゲータに戻る．すなわち，$\Delta b \lessapprox \hbar^{2/3}$ の条件をゆるめて，ユニフォーム近似を求める．おもしろいことに，ここでもカタストロフィー理論で使われる1つの定理が，数学的に重要な役割を果たすが，それは，よく知られた7個の初等カタストローフではないのだ．

ノート

15章は，次の論文

L. S. Schulman, Caustics and Multivaluedness : Two Results of Adding Path Amplitudes, in *Functional Integration and Its Applications*, Proceedings of a

1974 conference, A. M. Arthurs, Ed., Oxford University Press, London, 1975 の拡張であった．そのなかでもふれておいたが，研究の一部は，Steve Coyne と David MacLaughlin の学位論文に基づいている．それは，

S. Coyne, Semi-Classical Asymptotic Evaluation of Feynman Path Integrals, thesis, Indiana University, Bloomington, Ind., 1972

D. W. McLaughlin, The Path Integral : Its Approximation in Flat Space and its Representation in Curved Space, thesis, Indiana University, Bloomington, Ind., 1970

である．4次のコースティクの標準形(15-19)式を求めた際，3次のコースティクでは現われなかった微妙な点を無視した．3次のときには，(15-10)式の後の項をすべて調べた上で，a_1^3 を含む項だけを考えればよいと決定した．4次の場合にも，同じようなリストがあって，そのなかには $a_1^2 a_k$ $(k=2, 3, \ldots)$ を作用積分の一部として含んでいる．これらは，$\hbar$ のオーダー－で，それは a_1^4 と同じだから，落としてしまうことはできない．しかし，これらの項は，(15-19)式が正しいか否かには影響しない．というのは，収束の問題が発生しないとすると，2次の項の係数を変える役割しかしないから．これを見るために，$a_k (k \neq 1)$ の積分

$$\int da_k \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\lambda_k a_k^2 + \frac{1}{2}a_1^2 a_k \int dt \left.\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}\right|_{\bar{x}} \varphi_1^2 \varphi_k\right)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi\hbar i}{\lambda_k}}\ \exp\left[\frac{i a_1^4}{8\hbar\lambda_k}\left(\int dt \left.\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}\right|_{\bar{x}} \varphi_1^2 \varphi_k\right)^2\right]$$

を実行するとなにが起きるか考えてみよう．これから，$ia_1^4/\hbar$ の係数は，

$$\left[\frac{1}{4!}\int \left.\frac{\partial^4 V}{\partial x^4}\right|_{\bar{x}} \varphi_1^4 dt\right] - \frac{1}{8}\sum_k \frac{\left[\int \partial^3 V/\partial x^3|_{\bar{x}} \varphi_1^2 \varphi_k dt\right]^2}{\lambda_k}$$

で，単に1番目の項だけですますというわけにはいかない．(15-19)式の形にするには，a_1 に関してスケールし直す必要がある．上で述べた和が存在するなら，このスケーリングは可能である．

もっと高い次数のコースティクスについても同様なことが実行できる．かんじんなことは，$a_1^n a_j a_k$ $(1<j<k)$ の項が効いてくるようにしてはいけない，ということだ．もしそうだとすると，積分 da_m, $m>1$ が実行できなくなって，そういう項を1つ1つ消去できないからだ．しかし，a_j と a_k はともに $O(\hbar^{1/2})$ だから，この問題はたいしたことにはなりえない．

項$a_1^2 a_k$が項a_1^4に移行するという上の議論は，全然厳密ではなくて，漸近解析でしばしば起きるように，いちばん良い結果は陰関数定理を使うと得られる．積分に使う座標系は，$\delta^2 S$を対角化して得られるが，一方，ほかの交差項を消去するには少し違った座標系の方が良い．そういう座標系が存在することは，

R. S. Ellis and J. S. Rozen, Asymptotic Expansions of Gaussian Integrals, *Bull . Amer. Math. Soc.*, **3**, 705, 1980

に示されている．EllisとRosenは，ウイーナー積分の漸近展開を研究して，その厳密な結果が，縮重系の場合および2つの極小がくっつく場合にも拡張できることを発見した（14章のノートのSchilderを参照）．彼等は，実数のウイーナー積分を見ていたのだから，簡単な3次の場合を扱うことができたというような御利益に浴したのではなく，陰関数定理を使って，縮重した停留点では，測度がa_1^4のような非ガウス型の部分をひろってくるとを示したのである．

経路積分を通してコースティクスとカタストロフィーの関係を導くのは，魅力的な方法論を構成することがわかってきた．より詳しい研究は，

Cecile DeWitt-Morette and P. Tschumi, Catastrophes in Lagrangian Systems, in *Long Time Predictions in Dynamics*, ed. V. Szebehely and B. D. Tapley, Reidel, Dordrecht, Holland, 1976, pp. 57-69

Cecile DeWitt-Morette, The Semiclassical Expansion, *Ann. Phys.* **97**, 367 (1976)

S. Levit, U. Smilansky, and D. Pelte, A New Semiclassical Theory for Multiple Coulomb Excitation, *Phys. Lett.* **53B**, 39 (1974)

になされている．カタストロフィー理論の優れた解説は，

M. Golubitsky, An Introduction to Catastrophe Theory and its Applications, *SIAM Review* **20**, 352 (1978)

にある．これには参考文献も多く引用してある．

16章　コースティクスと ユニフォーム近似

15章でわれわれは，次の積分

$$
\begin{aligned}
&G(b+\Delta b, T; a)\\
&=\int da_1\ldots da_N \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[S(\bar{x})+\bar{p}(T)\Delta b+\frac{1}{2}\delta^2 S(\rho)+m\sum_j a_j\,\Delta b\,\dot{\varphi}_j(T)\right.\right.\\
&\qquad\qquad +\sum\lambda_j a_j\int_0^T \varphi_j(t)\rho(t)\,dt+\frac{1}{2}\sum_j \lambda_j a_j^2\\
&\qquad\qquad \left.\left.+\sum_{m=3}^{\infty}\frac{\delta^m S(\rho+y)}{m!}\right]\right\} \qquad (16\text{-}1)
\end{aligned}
$$

を評価した．これは，(15-9) 式と同じもの．記号の定義もそこで定義されたとおり．そこでは，小さい Δb，特に $\Delta b=O(\hbar^{2/3})$ のオーダーに対して，G への $(\hbar\to 0)$ における漸近的なふるまいを調べた．この章では，「Δb が小さい」という条件をはずしたらどうなるかを考える．

(16-1) 式の指数関数の中の変数全体の構造は，つぎのようになっている．まず，a_j の関数になっており，$j>1$ に対しては基本的に 2 次，a_1 については 3 次である．しかし，この基本的な性質は，あらゆる種類の 1 次および高次の項のおかげで，見にくくなっている．そこで，変数変換をして，多項式

$$z_1^3+\beta z_1+\sum_{j=2}^{N} z_j^2+\text{const.} \qquad (16\text{-}2)$$

の形にできるかを試してみよう．この変数を使って，$\Delta b<\hbar^{2/3}$ を要求しない分だけ 15 章のものとは少し違った積分の漸近近似を得る．

しかし，(16-2)式へは一足飛びでいくことはせず，(16-1)式に含まれている微妙な点を味わいながら，簡単な積分から順に積みあげていこう．停留点がくっつく場合の 1 次元積分から始めて，2 次元，多次元へと登っていく．

積分

$$J=\int_\Gamma g(w)\exp(-xf(w,\alpha))\,dw \tag{16-3}$$

を経路Γ，たとえば実w軸の上で考えよう．ここで，$x\to\infty$での漸近近似を見つけたい．$\partial f/\partial w=0$の2つの根が一致するところで，αを変化させる．簡単のために，$\alpha=0$で一致するものとしよう．前の章では，(16-3)式を扱うのにどうしたかというと，fを停留点のまわりで展開し，3次の項が積分に主な寄与をすることを見，そしてwの高次の項を捨てたのだった．これは，αがxのあるスケールにくらべて小さく，たとえば$\alpha=O(x^{-2/3})$を満たすときにのみ正しい．この制限が入ってきた理由は明らかである．$f=-\alpha w+w^3/3+w^4$を$\Gamma=[0,\infty)$の領域で考えてみよう．もし，$\alpha\ll x^{-2/3}$なら，w^3の項が支配的になって，wの積分の有効範囲は$x^{-1/3}$になり，w^4は$O(x^{-4/3})$の大きさで無視できる．一方，αを固定しておいて，xを大きくしていくと，$w=\sqrt{\alpha}$にある停留点は，$x^{-1/3}$より大きくなり，wの全体の大きさとしては，xが大きくなるにしたがってゼロに近づくということはなくなる．したがってw^4は，このとき無視できなくなる．

Chester， Friedman， Ursellは，これを解決するために，

$$f(w,\alpha)=\tfrac{1}{3}z^3-\beta z+\gamma \tag{16-4}$$

を満たす新しい変数を見つけることができることを示した．ただし，βとγは，αだけの関数である．(16-4)式は，級数展開ではない．wと1対1に対応する変数zがあって，それがf全体を3次式に変換できるというのだ．その写像を$z=Z(w)$とする．(16-4)式の証明は，なめらかさや解析性を仮定しているが（ここではその証明はしない），基本的には幾何学的な性質のものである．αを変えると停留点が近づいてくるということは，（たとえば）$\alpha>0$では，fは単調関数ではなく，最大値と最小値が互いに近くにいるということだし，一方$a\leqslant 0$でその最大値と最小値がくっつくけば，根本的に形が変わってしまい単調関数になるということを意味している．αの符号によって，凹凸ができたり消えたりして幾何学的に形を変えるという本質を，(16-4)式の3次式はとらえている．

変換Zが1対1であるためには，(16-4)式の両辺が，対応する点で，逆写像をもたなければならない．特に，両辺の$\partial/\partial z$，つまり

$$\frac{\partial f}{\partial w}\frac{dw}{dz}=z^2-\beta \tag{16-5}$$

が同時にゼロにならなければならない（これは，陰関数定理からもわかる）．f'がゼ

ロになる点を$w_1(\alpha)$および$w_2(\alpha)$とせよ．(16-5)式から，$z_1 \equiv Z(w_1)$と$z_1 \equiv Z(w_1)$が(16-5)式の右辺の解，すなわち，$\pm\sqrt{\beta}$であること，が要求される．これを(16-4)式に代入すると，この条件は

$$f(w_1, \alpha) = -\frac{2}{3}\beta(\alpha)^{3/2} + \gamma(\alpha)$$

$$f(w_2, \alpha) = \frac{2}{3}\beta(\alpha)^{3/2} + \gamma(\alpha) \tag{16-6}$$

となる．明らかに，$\alpha=0$のとき，$\beta=0$．(16-6)式は，αの関数として，βとγを決める．(16-3)式の積分は，変換で

$$J = \int_{\Gamma'} k(z)\exp\left[-x\left(\frac{1}{3}z^3 - \beta z + \gamma\right)\right] dz \tag{16-7}$$

と変る．ここで，積分経路Γ'は変換ZによるΓの像である．また，

$$k(z) = g(w)\frac{dw}{dz} \tag{16-8}$$

である．この段階で，重要な点を述べておこう．kをzの級数に展開し，形式的に和と積分の順序を入れかえてJの漸近級数を求めようと思ってもうまくいかない．この手続きは，変数βにおいて一様には成立しない．これは，$\beta > x^{-2/3}$では，zの実質的な大きさが$x^{-1/3}$ではなくて$\sqrt{\beta}$となるからである．かわりに，

$$k(z) = \sum_{m=0}^{\infty} p_m(\alpha)(z^2-\beta)^m + \sum_{m=0}^{\infty} q_m(\alpha)z(z^2-\beta)^m \tag{16-9}$$

と書こう．ここで，係数p_mとq_mは，通常のやりかたで決定できる．特に，

$$p_0 \pm \sqrt{\beta}\, q_0 = g(w_i)\sqrt{2\sqrt{\beta}\ /f''(w_i)} \tag{16-10}$$

である．ここで，上（下）側の符号は$i=1(2)$に対応する．いま，積分と和の順序を入れかえると，$x \to \infty$にしたがって，引き続くmの項は小さくなっていく．しかし，同じmに対しては，q_mとp_mは同じオーダーの寄与をもつ，ということには注意をはらっておいてよい．この結果ユニフォーム近似は，その最低次項に対してさえ，エアリ関数（掛けるp_0）だけではなく，その微分（掛けるq_0）まで与える［(16-11)式参照］．q_0の掛かった関数が，本当にエアリ関数の微分になっていることを見るために，(15-14)式$Ai(y) = (1/2\pi i)\int_\Gamma \exp(-ty - t^3/3)\,dt$（その積分経路$\Gamma$は図15-1参照）をもう一度考えてみよう．$y$について微分すると$t$が降りてきて，被積分関数が

$t\exp(ty-t^3/3)$ となるが，これは(16-9)式で q_0 の項の積分が与えるものと同じである．m の高次の項もエアリ関数とその微分を与えることは，部分積分をやってみればわかる．部分積分をつぎつぎと実行すると，$1/x$ についての高次の項が出てきて，漸近級数をなす．そのうちの，最初の項だけを得ることに留めて，その詳細には立ちいらないことにする．

(16-3)式の積分 J は，こうして，

$$J=e^{-x\gamma}\left[p_0x^{-1/3}Ai\left(x^{2/3}\beta\right)+q_0x^{-2/3}Ai'\left(x^{2/3}\beta\right)\right]\left[1+O(x^{-1})\right] \qquad (16\text{-}11)$$

と与えられる．ここで，β と γ は(16-6)式で定義された α の関数，また，p_0 と q_0 は，(16-10)式で与えられた．(16-11)式のなかの x のべき（つまり，$x^{-1/3}$ と $x^{-2/3}$）が正しいことは，(15-8)式を導くときにやった変数変換をしてみれば確かめられる．微分 Ai' は，その変数についてとる．$\beta=O(x^{-2/3})$ でないかぎり，(16-11)式の p_0 と q_0 の項は，漸近的に x について同じ程度の大きさになることにも注意せよ．

(16-1)式を実行するというわれわれの最終目標に向けて，つぎは，

$$J_2=\int g(w_1,w_2)\exp\left[-xf(w_1,w_2;\alpha)\right]dw_1\,dw_2 \qquad (16\text{-}12)$$

を考える．停留点を $f_1\equiv\partial f/\partial w_1=0$ と $f_2\equiv\partial f/\partial w_2=0$ で定義する．ここでも，$\alpha>0$ では，停留点は2個あり，$\alpha\to0$ につれてそれらが近づいてき，$\alpha<0$ では，解 $f_1=0$ と $f_2=0$ が積分領域にはない，と仮定しよう．$\alpha=0$ では，f が，上の積分 J の場合と同じように，3次の停留点1個と，なんでもない2次の停留点1個，をもつようにとる．J_2 を調べる目的は，よぶんにつけた「なんでもない」はずの2次の停留点が，(16-11)式で得た展開に，どの程度，悪さをするかを見ておくことである．

まず，J_2 にはなにもたいして変わった点があるわけではないことを，すばやくチェックしておこう．方程式 $f_2(w_1,\ w_2\,;\alpha)\equiv0$ を考えよ．これは，（$f_2(w_1,\ W(w_1,\ \alpha)\,;\ \alpha)\equiv0$）を通して）$W(w_1,\ \alpha)$ を定義するが，これは座標の選択に失敗しないかぎり，これは $\alpha>0$ では明瞭に定義された関数である．ここで，もし $f(w_1,\ w_2\,;\alpha)$ を点 $(w_1,\ W(w_1,\ \alpha))$ のまわりで展開すると，w_2 に関するガウス積分が出てきて，積分 J_2 に $[\pi/f_{22}(w_1,\ W(w_1,\ \alpha)\,;\alpha)]^{1/2}$ なる因子が現われる．指数関数に残るのは，w_1 のあらわな関数 $xf(w_1,\ W(w_1,\ \alpha)\,;\alpha)$．$\alpha\to0$ につれて，この関数の停留点が接近する．実際，元の関数と同じように，この関数の停留点は w_1 の同じ値の点に存在する．これは，

$$\frac{\partial}{\partial w_1}f(w_1,W(w_1,\alpha);\alpha)=\frac{\partial f}{\partial w_1}+\left.\frac{\partial f}{\partial w_2}\right|_{w_2=W}=\frac{\partial f}{\partial w_1}$$

からくるが，これは，W の定義によって $f_2(w_1,\ W\,;\alpha)=0$ となるから．結果として，

w_1の積分は(16-3)式の形になり，エアリ関数とその微分が出てくる．多変数$w_1, \ldots, w_N$のときには，こういうやり方で(16-12)式を評価するのは大変である．

(16-12)式に対するもっと直接的なやり方は，$\alpha=0$における$f_1=f_2=0$の1つの解$(\overline{w}_1, \overline{w}_2)$のまわりでべき級数に展開することである．この点では，行列$\partial^2 f/\partial w_i \partial w_j$は，ゼロ固有値をもつだろうから，座標回転をうまくやれば15章の状況に戻る．すなわち

$$
\begin{aligned}
f(w_1, w_2; \alpha) = f + \tfrac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial w_2^2}(w_2 - \overline{w}_2)^2 + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 f}{\partial w_1^3}(w_1 - \overline{w}_1)^3 \\
+ \alpha\frac{\partial f}{\partial \alpha} + \alpha(w_1 - \overline{w}_1)\frac{\partial^2 f}{\partial \alpha \partial w_1} + \alpha(w_2 - \overline{w}_2)\frac{\partial^2 f}{\partial \alpha \partial w_2} \\
+ \mathrm{O}(\alpha^2) + \mathrm{O}\big((w_2 - \overline{w}_2)^3\big) + \mathrm{O}\big((w_1 - \overline{w}_1)^4\big) + \cdots \qquad (16\text{-}13)
\end{aligned}
$$

ただし，右辺のfはすべて，$(\overline{w}_1, \overline{w}_2\,; a)$の上で評価するものとする．また，すでに，$\partial^2 f/\partial w_i \partial w_j$のゼロ固有値に属する固有ベクトルが$(w_1 - \overline{w}_1)$の方向になるように，座標を選んでいるものと仮定した．しかし，この方法だとユニフォーム近似とはならないことがわかるので，別の戦略が必要になる．

(16-3)式の形と，(16-4)式でのやり方から，われわれが欲しいものは，

$$
f(w_1, w_2; \alpha) = \tfrac{1}{3}z_1^3 - \beta(\alpha) z_1 + \frac{1}{2}z_2^2 + \gamma(\alpha) \qquad (16\text{-}14)
$$

を厳密に満たす変数z_1とz_2であって，級数の最初の項といったものではないことは，明らかである．α（およびαの関数β）を変化させると，(16-14)式の両辺がくっついた停留点をもつことから，トポロジカルには，この方法がうまくいくと期待することができる．(16-12)式の漸近的なパラメータxの大きさは，(16-14)式の正しさには関係がなく，変換が存在するαの領域はfの大域的な挙動だけで決まってくる．

ひとたび(16-14)式の右辺の標準形ができてしまえば，積分は以前のものと同じになる．関数$g(w_1, w_2)$とヤコビアン$\partial(w_1, w_2)/\partial(z_1, z_2)$の積から，$z_1$と$z_2$の関数が現われて，おとなしい積分（つまり，$x \to \infty$の影響がない積分）に掛かってくる．$z_2$の積分の最低次の項は，ガウス積分から得られる．一方，z_1の積分から，(16-11)式のように2つの項が出る．

変換(16-14)式が存在することの証明は，N変数の一般的な場合の議論まで先延ばしすることにする．

もう1つ，別の煩雑さを引き起こす可能性がある問題を調べておかなければならない．積分

$$
K = \int g(w_1, w_2) \exp\left[-x f(w_1, w_2; \alpha)\right] dw_1 dw_2 \qquad (16\text{-}15)
$$

を考えよ．$\boldsymbol{\alpha}$は，数個の成分をもち（いまの目的には，3変数で十分だとあとでわかる），$|\boldsymbol{\alpha}|\to 0$の極限で4個の停留点が一致するとする．明らかに，(16-14)式の表現では，停留点での形が不十分である．4個の停留点がくっつくといっているだけでは，特異点の性格をしっかり特定したことにはならない．そこで，さらに，$\boldsymbol{\alpha}=0$で，行列$\partial^2 f/\partial w_i \partial w_j$が2個のゼロ固有値をもつと仮定する（4個の停留点をもたせるほかの方法としては，$f=w_2^2+w_1^5+\alpha_3 w_1^3+\alpha_2 w_1^2+\alpha_1 w_1$を使うことが典型的である）．2変数方向がともに含まれている場合のfの標準形は，

$$f(w_1, w_2; \boldsymbol{\alpha})=\tfrac{1}{3}z_1^3+\tfrac{1}{3}z_2^3-\beta_1(\boldsymbol{\alpha})z_1-\beta_2(\boldsymbol{\alpha})z_2-\beta_{12}(\boldsymbol{\alpha})z_1 z_2+\gamma(\boldsymbol{\alpha}) \qquad (16\text{-}16)$$

である．ここでも，この等式は，ある関数$z_1=Z_1(w_1, w_2)$と$z_2=Z_2(w_1, w_2)$に対して成立する．ただし，$\boldsymbol{\beta}$とγは$\boldsymbol{\alpha}$の関数．これらの変換が存在することを示すために，ふたたびトポロジカルな議論を行なう．(16-16)式の両辺の最大値と最小値のとるパターンは，$\boldsymbol{\alpha}=0$の近傍なら，すべての$\boldsymbol{\alpha}$に対して同じはずである．したがって，$\boldsymbol{\beta}$を変えながら$\boldsymbol{\alpha}$を変えていけば（あるいは，その反対の順序でもよい），すべてのパターンが得られるはずである．β_1とβ_2の必要性は，前でやった1変数の場合からも明らかである．加えてβ_{12}が必要なのは，図16-1を見ればわかる．図16-1は，関数

$$P(z_1, z_2; \boldsymbol{\beta})=\tfrac{1}{3}z_1^3+\tfrac{1}{3}z_2^3-\beta_1 z_1-\beta_2 z_2-\beta_{12}z_1 z_2 \qquad (16\text{-}17)$$

の等高線図で，それぞれ，(a)$\beta_1>0$，$\beta_2>0$，$\beta_{12}=0$，(b)$\beta_2>0$，$\beta_1=\beta_{12}=0$，および(c)$\beta_1=\beta_2=0$，$\beta_{12}\neq 0$の場合がプロットしてある．β_1とβ_2だけでは，図16-1(c)のトポロジーはどうにもならないことに注意せよ．[(c)の場合は，(a)で最小点と2つの鞍点を1つの点に一致させれば得られるが，β_{12}がなければ，それができない.] もちろん，図16-1を見せただけでは，(16-16)式の表現が一意的に存在するということの証明にはほとんどならないことは，わかっている．しかし，これも，あとでN変数の場合を考えるまで，お預けにしておこう．

積分Kは，以上から，

$$K=\int k(z_1, z_2)\exp[-xP(z_1, z_2; \boldsymbol{\beta})]\,dz_1 dz_2 \qquad (16\text{-}18)$$

となる．ただし，$k=g\partial(w_1, w_2)/\partial(z_1, z_2)$．関数$k$を展開したいが，$J$のところで見たように，$z_1$と$z_2$で単純にべき級数展開したのでは，漸近展開にならない．しかも，Jの漸近展開では，エアリ関数だけではなくその微分も必要だったように，Kの最低次の項についても2つ以上の関数が必要になる．具体的には，つぎの関数

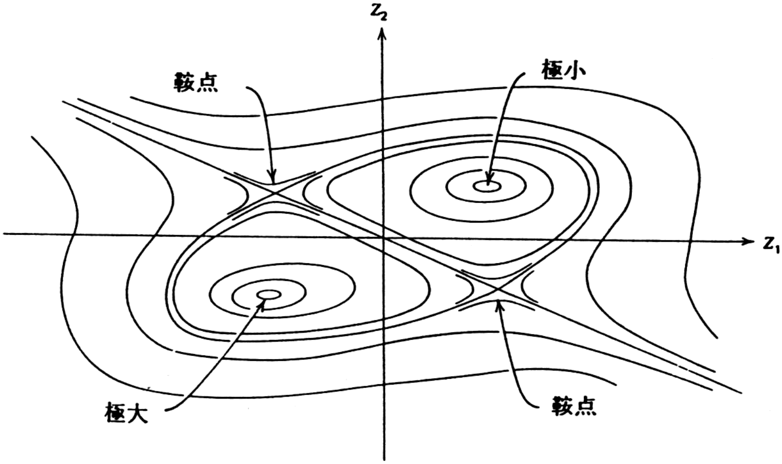


図16-1(a)

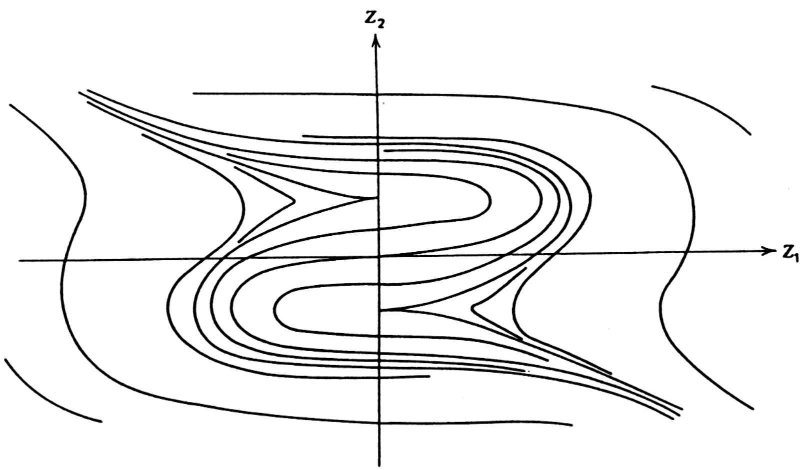


図16-1(b)

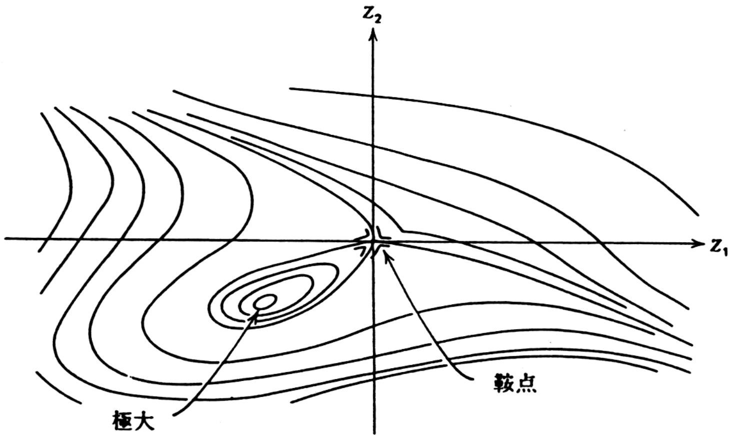


図16-1(c)

図16-1　関数$P(z_1, z_2; \beta)=(1/3)z_1^3+(1/3)z_2^3-\beta_1 z_1-\beta_2 z_2-\beta_{12}z_1 z_2$, (16-7)式，の等高線図.
(a) $\beta_1=\beta_2>0$, $\beta_2=0$. 鞍点は$P=0$の等高線上で発生する.
(b) $\beta_1=\beta_{12}=0$, $\beta_2>0$. この地図には，最大も最小もないし，等高線が接近したり横切ったりしない.
(c) $\beta_1=\beta_2=0$, $\beta_{12}>0$. 鞍点は$P=0$上で起きる.

$$U(\boldsymbol{\beta})=\int \exp[-xP(z_1, z_2; \boldsymbol{\beta})]\,dz_1 dz_2$$

$$\frac{1}{x}\frac{\partial U(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_i}=\int z_i \exp[-xP(z_1, z_2; \boldsymbol{\beta})]\,dz_1 dz_2 \qquad i=1,2$$

$$\frac{1}{x}\frac{\partial U(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_{12}}=\int z_1 z_2 \exp[-xP(z_1, z_2; \boldsymbol{\beta})]\,dz_1 dz_2 \tag{16-19}$$

が現われてくる．Kをこれらの関数で展開するときの係数は，(16-10)式から(16-11)式で使ったものと本質的に同じ方法で得られる．

さて，N変数の一般的な場合に入ろう．(16-1)式を見ると，指数関数の肩に$W\!\!>(a_1, \ldots, a_N; \Delta \boldsymbol{b})\!\!>$の形の関数があって，そのべき級数は，　$\Delta \boldsymbol{b}=0$の場合では$a_1^3\sum_{j=2}^{N} a_j^2$ から始まる．$\Delta \boldsymbol{b}\neq 0$の場合には，これらの変数からなる別の項をひろってくる．積分J, J_2, Kの経験から，われわれが欲しい変数$z_1, \ldots, z_N$は，W自体が，そのべき級数展開の最初の数項と同じ関数形をもつ多項式に，厳密に変換されるようなものであると示唆される．つまり，つぎの形の表現

$$W(a_1,\ldots,a_n;\Delta\mathbf{b})=z_1^3-\beta(\Delta\mathbf{b})z_1+\sum_{j=2}^{N}z_j^2+\gamma(\Delta\mathbf{b}) \qquad (16\text{-}20)$$

を求めたい．ここで，βとγは$\Delta\boldsymbol{b}$の関数．

ここで，カタストロフィー理論が役に立つ．なんらかの特異点をもつ関数を，標準形にもちこむところが，この理論の重要な点である．そうするために，いくつかのいわゆる予備定理がある．そのうち，ここでは，解析関数に関するいちばん簡単なものを，どんなものか知ってもらう程度に述べておこう．

ワイエルシュトラース(Weierstrass)の予備定理：$\mathbf{C}\times\mathbf{C}^n$の原点の近傍$U$で写像$F:U\to\mathbf{C}$が解析的とする．$F$は，$F(w,0)=w^k g(w)$を満たすとする．ただし，$(w,0)\in\mathbf{C}\times\mathbf{C}^n$であり，$g$は，原点近傍では1複素変数$w$の関数であり，特に，$g(0)\neq 0$．また，$k$は正の整数．このとき，解析関数$h:U'\to\mathbf{C}$と解析関数列$\gamma_0,\ldots,\gamma_{k-1}:V\to\mathbf{C}$が存在して，$\mathbf{C}\times\mathbf{C}^n$の原点のある近傍のすべての点$(w,z)$に対して，$h(0)\neq 0$として

$$(hF)(w,z)=w^k+\sum_{j=0}^{k-1}\gamma_j(z)w^j$$

がなりたつ．ただし，U'は$\mathbf{C}\times\mathbf{C}^n$の原点近傍，$V$は$\mathbf{C}^n$の原点の近傍である．

もちろん，この定理の裏には陰関数が隠されている．この強力な予備定理を生かすには相当の努力が必要である．

解析関数に対するワイエルシュトラースの予備定理に対応して，なめらかな(C^∞)関数に対してMalgrangeの予備定理がある．その後，精密化，拡張，一般化，が行なわれ，Mather，Nirenberg，Thomといった人たちの多くの研究が続き，(16-20)式の標準形にいたっている．正確を期すためにいっておくと，一般には，私が(16-20)式でやったように結果を表現するわけではない．むしろ，文献では，芽(germ)，ジェット(jet)，束(bundle)，特異点の開折(unfolding)といった言葉が使われている．(16-20)式にいたる座標変換の存在は，最終的には，いま私が引用した研究から導かれるといって間違いでない．

(16-20)式は，ほかにもたくさんとりうる可能性の1つでしかない．コースティクスでとりうるすべての可能な形は，有名な7つの初等カタストローフで与えられる．コースティクスの形は，Wの特異点の部分（つまり，2次でない部分）で決まってくる．その特異点は，1次微分と2次微分が同時にゼロになることで指定される．

(16-20) 式の3次項のほかに，ほかのタイプの特異点の例を挙げておこう，たとえば

$$z^n,\quad n\geqslant 3;\qquad z_1^n+z_2^m,\quad n,m\geqslant 3;\qquad \exp\left(-\frac{1}{z^2}\right)\tag{16-21}$$

がある．それぞれの特異点に対して，開折の方法がある．単純な（しかしあいまいではあるが）言葉で表現すると，開折は，(16-16) 式で必要だった係数 β_1, β_2, β_{12} のように，すべてのトポロジカルに異なった関数を得るのに必要な低次の項から構成される（「トポロジカルに等しい」といった場合，以下のことを表わす．$f, g: M\to N$ を，多様体 M から多様体 N への，なめらかな写像とする．もし，同相写像 (homeomorphism) $h: M\to M$ と $k: N\to N$ が，存在して $f\circ h=k\circ g$（$\circ$ は合成）となるとき，f と g は等しい，という）．そのような特異点が起きることをカタストローフといい，その次元は，普遍的な開折に必要なパラメータの数に一致する．上で見たように，これらのパラメータは配位空間の上に写像され，開折の抽象パラメータ空間での正準的な構造を，配位空間ではコースティクが反映している．したがって，背景にあるダイナミックスのなかのカタストローフから生じる時空上のどんな現象も，開折が4個以下のパラメータで記述されるカタストローフを含む（ただし，対称性からくる例外を除く．われわれは，一般的な性質だけを考えている）．Thom は，4次元以下で可能なすべてのカタストローフを見いだした．7個ある．つまり，x^3（折り目），x^4（くさび），x^5（つばめの尾），x^6（蝶），x^3+y^3（双曲的へそ），x^3+3xy^2（楕円的へそ），x^2y+y^4（放物的へそ）．4パラメータのカタストローフは，コースティクスの3次元動画で見ることができる．

停留位相法の立場からは，1つ1つのカタストローフは，それを特徴づける特性関数（折り目に付随したエアリ関数のように）をもつ．漸近展開では，開折に現われるパラメータに対して，特性関数の，パラメータに関する微分が必要となる．

以上の理論の主な物理的応用としては，散乱理論，そしてもちろん，光学がある．あとの章で，散乱理論に対して経路積分の定式化を行ない，半古典近似（すなわち，経路積分を，経路の密度を考慮した古典経路だけの項で置き直す近似）が，いかに，重い複合粒子系の散乱に適しているかを示す．散乱自身は重い粒子の古典経路方向に沿って起きるが，内部座標に量子効果があって重要な役割を果たしている場合に，この近似は，特に有効である．こういう状態は，原子，分子，原子核の物理で見られる．また，特定のエネルギーおよび散乱角で，焦点の効果，つまり，コースティクスが（一般的な性質として）役割をもつこともある．こんなときは，この章でやった仕掛けが必要になってくる．具体的な応用については，以下の文献に譲ろう．

ノート

2つの停留点がくっつく場合のユニフォーム近似は,

C. Chester, B. Friendman, and F. Ursell, An Extension of the Method of Steepest Descents, *Proc. Camb. Phil. Soc.* (*Ser. Physica*) **53**, 599 (1957)

に与えられている. 原子, 分子の散乱に目を向けた発展が,

J. R. Stine and R. A. Marcus, Semiclassical Transition Probabilities by an Asymptotic Evaluation of the S Matrix for Elastic and Inelastic Collisions. Bessel Uniform Appoximation, *J. Chem. Phys.* **59**, 5145 (1973)

J. N. L. Connor, Asymptotic Evaluation of Multidimensional Integrals for the S Matrix in the Semiclassical Theory of Inelastic and Reactive Molecular Collisions, *Mol. Phys.* **25**, 181 (1973)

J. N. L. Connor, Semiclassical Theory of Molecular Collisions : Three Nearly Coincident Classical Trajectories, *Mol. Phys.* **26**, 1217 (1973)

J. N. L. Connor, Evaluation of Multidimensional Canonical Integrals in Semiclassical Collision Theory, *Mol. Phys.* **26**, 1371 (1973)

J. N. L. Connor, Multidimensional Canonical Integrals for the Asymptotic Evaluation of the S-Matrix in Semiclassical Collision Theory, *Faraday Discussions of the Chemical Society* **55**, 51 (1973)

J. N. L. Connor, Catastrophes and Molecular Collisions, *Mol Phys.* **31**, 33 (1976)

W. H. Miller, Semiclassical Theory of Atom-Diatom Collisions : Path Integrals and the Classical S-Matrix : *J. Chem. Phys.* **53**, 1949 (1970)

W. H. Miller, Classical S-Matrix : Numerical Application to Inelastic Collisions, *J. Chem. Phys.* **53**, 3578 (1970)

W. H. Miller and T. F. George, Analytic Continuation of Classical Mechanics for Classically Forbidden Collision Processes, *J. Chem. Phys.* **56**, 5668 (1972)

P. Pechukas and M. S. Child, *Mol. Phys.* **31**, 973 (1976)

P. Pechunkas, *Phys. Rev.* **181**, 166 (1969)

P. Pechunkas, *Phys. Rev.* **181**, 174 (1969)

A. P. Penner and R. Wallace, *Phys. Rev.* ***A*7**, 1007 (1973)

A. P. Penner and R. Wallace, *Phys. Rev.* ***A*9**, 1136 (1974)

A. P. Penner and R. Wallace, *Phys. Rev.* ***A*11**, 149 (1975)

に見られる．核物理学では，経路積分から始まったユニフォーム近似が

S. Levit, U.Smilansky, and D. Pelte, *Phys. Lett.* **53B**, 39 (1974)

S. Levit, Semiclassical Approximation to Path Integrals-Phases and Catastrophes, in G. J. Papadopolis and J. T. Devreese, eds., *Path Integrals and Their Applications in Quantum, Statistical and Solid State Physics* (Proc. NATO Adv. Study Ins., Antwerp 1977), Plenum, New York, 1978（この本にのっている文献も参照のこと）

にある．カタストロフィー理論（この章でガタガタのギヤを使って私が展開した理論）を使った振動積分の一般論は，

J. J. Duistermaat, *Commun. Pure and Appl. Math.* **27**, 207 (1974)

にある．ユニフォーム近似の必要性は，

M. V. Berry and K. E. Mount, Semiclassical Approximations in Wave Mechanics, *Rep. Prog. Phys.* **35**, 315 (1972), p. 384

に説かれている．また，カタストロフィー理論と半古典論との関係は，

M. V. Berry, *Adv. Phys.* **25**, 1 (1976)

で議論されている．

17章　半古典近似の振幅項に現われる位相因子

半古典近似の振幅項は，aを始点，bを終点として，$\sqrt{\partial^2 S_c/\partial a \partial b}\ \exp(iS_c(b,t;a)/\hbar)$の形をしている．$(\partial^2 S_c/\partial a \partial b)^{-1}$は，焦点でゼロになるので，この平方根の符号があいまいになってくる．この章では，この符号，すなわち，振幅項の位相を定める方法を2通り紹介しよう．1つは，モース(Morse)理論を使い，もう1つは，微分方程式を直接使う方法である．この位相は，ボーア - ゾンマーフェルト(Bohr-Sommerfeld)の量子化条件，特に，$2\int pdq=\{n+(1/2)\}h$の1/2の因子を決めるのに重要である．

モース理論は，実は，本書でも12章から14章にかけて，その理論的背景をなしていた．$\partial^2 S_c/\partial a \partial b$（あるいは，その行列式としての多次元化版）は，$\delta^2 S$の固有値の積の形で現われた．もし，これらの固有値がすべて正ならば，プロパーゲータのなかで$\exp(iS_c/\hbar)$に掛かっている係数の全体の位相（問題にしている意味での位相）は，ゼロである．これは，もともとの経路積分の極限としての規格化が各次元で$\sqrt{-i}$だけであり［(1-24)式参照］，これが，$\delta^2 S$を対角化する各座標上でのガウス積分から生じる全位相をキャンセルするようになっていたからである．$\delta^2 S$に負の固有値が現われると，それぞれで，積分$\int da \exp(i|\lambda|a^2)$が$\int da \exp(-i|\lambda|a^2)$で置きかわるから，係数のなかの因子$\sqrt{1/-i}$が$\sqrt{1/i}$になる．つまり，$\delta^2 S$の負の固有値1個当たり$\exp(i\pi/2)$が出る．一方，モース理論によれば，古典軌道に沿って計算した$\delta^2 S$の負固有値の数は，軌道上の焦点の数（その多重度も含めて）に等しいことがわかっている．要約すると，半古典プロパゲータに対する，各古典軌道からの寄与は，

$$(-2\pi i\hbar)^{-d/2}\exp(-i\pi n/2)\left|\sqrt{\det(\partial^2 S_c/\partial a \partial b)}\right|\exp\left[iS_c(b,t;a)/\hbar\right]$$

と書かれる．ここで，nは，軌道上の焦点の多重度の和，dは，座標空間の次元数．

つぎに，この結果を，微分方程式の立場から証明してみよう．ここでは，話しを半古典近似に限定しているので，2次のラグランジアン$L=(1/2)m\dot{x}^2-(1/2)W(t)x^2$だけ考える．この場合のグリーン関数は，

$$G(x,t;0,0)=\exp(iS_c/\hbar)\int_{(0,0)}^{(0,t)}dy(\tau)\exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\int_0^t(m\dot{y}^2-Wy^2)\,d\tau\right\}$$
$$=\exp\left(\frac{iS_c}{\hbar}\right)G(0,t;0,0) \tag{17-1}$$

を満たす．ただし，S_cは$(0, 0)$と(x, t)をつなぐ古典経路上での作用積分．fが，微分方程式

$$m\frac{d^2f}{dt^2}+W(t)f=0 \tag{17-2}$$

を，境界条件

$$f(0)=0, \qquad \dot{f}(0)=1$$

のもとで満たすものとする．線形性から，$(0, 0)$から(x, t)にいたる古典経路は，

$$x(\tau)=x\frac{f(\tau)}{f(t)} \tag{17-3}$$

と書け，作用積分も容易に

$$S_c=\tfrac{1}{2}mx^2\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \tag{17-4}$$

と計算できる．関数

$$g(t)=G(0,t;0,0)$$

を定義する．前にやったことから，gは本質的に，$1/\sqrt{f}$ であることがわかっているが，ここでもう一度，位相に注意して導いてみよう．まず，$t>0$において$G(x, t;0, 0)$は，シュレーディンガー方程式を満たす．つまり，

$$0=\left(H-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)G(x,t;0,0)$$
$$=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}W(t)x^2-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\}\left[g(t)\exp\left(\frac{imx^2\dot{f}}{2\hbar f}\right)\right]$$
$$=\left[-\frac{i}{2}\frac{\dot{f}(t)}{f(t)}-i\frac{\dot{g}(t)}{g(t)}\right]\hbar G(x,t;0,0) \tag{17-5}$$

である．これから，$d(\log g)/dt=-(1/2)d(\log f)/dt$が得られ，結局

$$g(t)=\frac{c(t)}{|f(t)|^{1/2}} \tag{17-6}$$

となる．ここまでは，微分方程式をtで積分する際，$f(t)\neq 0$としてきた．量$c(t)$は，$f(t)\neq 0$のときは定数である．しかし，tが$f(t)$のゼロを通過するときには，変わることができる．どのように変化するだろうか．

t_0で$f(t)$がゼロ（単純ゼロ点）になったとする．すると，

$$G(0,t_0+\varepsilon;0,0)=\int dx\, G(0,t_0+\varepsilon;x,t_0-\delta)G(x,t_0-\delta;0,0) \tag{17-7}$$

から，

$$\frac{c(t_0^+)}{|f(t_0+\varepsilon)|^{1/2}}=\int dx\, G(0,t_0+\varepsilon;x,t_0-\delta)\frac{c(t_0^-)}{|f(t_0-\delta)|^{1/2}}\exp\left[\frac{imx^2\dot{f}(t_0-\delta)}{2\hbar f(t_0-\delta)}\right] \tag{17-8}$$

を満たすような，小さいεとδが存在する．グリーン関数は，例によって，

$$G(0,t_0+\varepsilon;x,t_0-\delta)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(\varepsilon+\delta)}}\exp\left[\frac{imx^2}{2\hbar(\varepsilon+\delta)}\right] \tag{17-9}$$

で与えられるから，ガウス積分を実行してやると，

$$\frac{c(t_0^+)}{|f(t_0+\varepsilon)|^{1/2}}=\frac{c(t_0^-)}{|f(t_0-\delta)|^{1/2}}\left[1+(\varepsilon+\delta)\frac{\dot{f}(t_0-\delta)}{f(t_0-\delta)}\right]^{-1/2} \tag{17-10}$$

が得られる．fが単純な解しかもたないと仮定すると，これから，

$$c(t_0^+)=c(t_0^-)e^{-i\pi/2} \tag{17-11}$$

を得る．この式が正しいことは，εやδの相対的な大きさには依らない．

演習：　もし，fが2重根をもつとすると，いま示したことは，意味がなくなってしまう．なぜか？「高次の焦点に対しては，その多重度に応じて，位相に$\pi/2$を追加しておけばよい.」という主張を，いまの例にならって証明するにはどうすればよいか．

この証明で私がもっともおもしろいと思うのは，ある意味で，それがモース理論の微分方程式論的な証明になっているということである．

ノート

(17-7)式を使って，プロパゲータの焦点での性質を調べるというアイデアは，

P. Pechukas, *Phys. Rev.* **181**, 166 (1969)

による．焦点を通過する際，位相が変わるというのは，光学のほうでは古くから知られていることである．

M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon, New York, 1959.
を見よ．

18章　エネルギーの関数としてのプロパゲータとその半古典論

この章まででわれわれがWKBとよんできていた近似は，普通に出くわすWKB近似と少しも似てはいない．これに戻るために，7章で述べたエネルギーの関数としてのプロパゲータを調べてみよう．それは，

$$\tilde{G}(x,y;E)=\int_0^\infty dt\exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)G(x,t;y,0) \tag{18-1}$$

と定義される．ただし，例によって，$E\sim E+i\varepsilon$，$\varepsilon\downarrow 0$．$G(x,t;y,0)$のWKB近似は，

$$G_{\text{WKB}}(x,t;y,0)=\sum_\alpha\sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_\alpha}{\partial x\,\partial y}\right)}\;e^{iS_\alpha/\hbar}$$
$$=\sum_\alpha\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^{d/2}\sqrt{\left|\det\frac{\partial^2 S_\alpha}{\partial x\,\partial y}\right|}\;e^{i[(S_\alpha/\hbar)-n\pi/2]}$$

である．ここで，αは$(y,0)$から(x,t)にいたる古典経路を指定し，dは空間の次元数，nは経路αに沿ってのδ^2Sの負固有値の数（別のいい方をすると，αに沿っての焦点の次数の和）である．G_{WKB}を(18-1)式に代入して，停留位相近似で$\hbar\to 0$での最低次の項を計算する．停留条件は，

$$\frac{\partial}{\partial t}\big(Et+S_\alpha(x,y;t)\big)=0 \tag{18-2}$$

である．与えられたEとαに対して，（一般には，複数個の）解tがある（それらをβで区別する）．つまり，

$$E=-\frac{\partial S_\alpha(x,y;t_{\alpha\beta})}{\partial t} \tag{18-3}$$

をである．おのおのの$t_{\alpha\beta}$に対して，(18-1)式にガウス近似を実行すると，最低次の項

$$\tilde{G}_{\mathrm{WKB}}(x, y; E) = \left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^{d/2} \sum_{\alpha,\beta} \sqrt{|\det \partial^2 S/\partial x\, \partial y|}$$
$$\times \exp\left[-\frac{in\pi}{2} + \frac{iS_{\alpha\beta}}{\hbar} + \frac{iEt_{\alpha\beta}}{\hbar}\right] \int_0^\infty dt\; e^{i(\partial^2 S/\partial t^2)(t - t_{\alpha\beta})^2/2\hbar} \quad (18\text{-}4)$$

を与える（サブスクリプト$\alpha\beta$は落したものもある）．積分から

$$\frac{\det(\partial^2 S/\partial x\, \partial y)}{\partial^2 S/\partial t^2} \quad (18\text{-}5)$$

が出るが，その平方根がプロパゲータの因子となるわけである．ただし，位相は別途扱うことにする．(18-3)式を通して，独立変数としてtからEに移すのはルジャンドル変換であり，つぎの関数

$$W(x, y, E) = S + Et \quad (18\text{-}6)$$

を定める．

つぎに，(18-5)式をWを使って表わしたい．関係式

$$\frac{\partial W(x, y, E)}{\partial E} = t, \qquad \frac{\partial S(x, y; t)}{\partial u} = \frac{\partial W(x, y, E)}{\partial u} \quad (18\text{-}7)$$

がある．ここで，uはxまたはyのいずれかの成分で，各関数のその他の変数は固定されている．これらから，

$$\left.\frac{\partial^2 S}{\partial u\, \partial v}\right|_t = \left.\frac{\partial^2 W}{\partial u\, \partial v}\right|_E + \frac{\partial^2 W}{\partial u\, \partial E}\frac{\partial^2 W}{\partial v\, \partial E}\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \quad (18\text{-}8)$$

が出る．ここで，uとvは，それぞれ，xとyの成分．(18-7)式と(18-3)式から，

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = -\left(\frac{\partial^2 W}{\partial E^2}\right)^{-1} \quad (18\text{-}9)$$

が導かれる．これらの等式をまとめて，(18-5)式を拡大された行列式の形に書くと便利である．すなわち．

$$-\frac{\det(\partial^2 S/\partial x\, \partial y)}{\partial^2 S/\partial t^2} = \det\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 W}{\partial x\, \partial y} & \dfrac{\partial^2 W}{\partial x\, \partial E} \\ \dfrac{\partial^2 W}{\partial y\, \partial E} & \dfrac{\partial^2 W}{\partial E^2} \end{bmatrix} \equiv \tilde{D} \quad (18\text{-}10)$$

$G(x, t; y, 0)$を解く際に考えた位相の問題は，ここでもう一度考え直す必要がある．というのは，$\partial^2 S/\partial t^2$がそれ自身でゼロや無限大をもち，それにともなって，符号が変化するからである．つぎに示すように，$\partial^2 S/\partial x \partial y$が無限大のとき$\partial^2 S/\partial t^2$も無限大となり，したがって，$t$表示で位相因子を与えた焦点は，ここでは重要ではなくなる．この無限大は，$\partial^2 S/\partial t^2$つまり$-\partial E(x, y, t)/\partial t$からくる．$\partial t/\partial E$をかわりに考えてみる

と，エネルギーを微小変化させてみても，焦点での時間変化は高次（$O[(\Delta E)^2]$）の微小変化しかしないことがわかる．それゆえ，同じ初期点yと最終点xをもつが，少しだけ違ったエネルギーをもつ境界値問題を考えてみよう．変分は，特定の経路x_αのまわりでとる．yとxが互いに共役であるということは，同じ(x, t)で終わる，いろいろな初期運動量からなる経路の1-パラメータ族があるということを意味する．つまり，Eを変えても，時間の方は（最低次で）変わらない．よって，$\partial t/\partial E$はゼロ．

上の議論は，発見法的に行なったが，(18-10)式に戻って最終的に正しい結果を得ることができる．この式の右辺の行列式から発生する無限大は，一般には，行列式$\det\partial^2 S/\partial x\partial y$から生ずるそれとは異なる．前者がどこにあるか調べてみよう．(18-10)式から，その発散は$\partial^2 S/\partial t^2$のゼロ点と一致するが，それは，$\partial t/\partial E$の発散点と同じである．この発散は一方，固定した$y$に対して$x$が古典運動のターニングポイントに来たときに起きるといえる．ターニングポイントでは，運動は比較的長い時間を費やす．x（そして，もちろんy）をそこで固定したまま，Eを変えると，xはターニングポイントでなくなる．もう少し正確にいうと，ポテンシャルVの上での運動に対して，

$$t=\int_y^x \frac{\sqrt{m}\,du}{\sqrt{2(E-V(u))}} \tag{18-11}$$

がなりたつ．この積分は，xがターニングポイント（そこで$(V(x)=E)$が成立）であっても，有限．しかし，Eに関するその微分はそうではない（ターニングポイントを通り過ぎてしまった軌道に対しては，微分は有限値にもどる．しかし，その計算には，注意を要する）．

エネルギーの関数としてのWKBグリーン関数の位相は，以上の理由から，(18-10)式の右辺の行列式が何回発散点を通過するかで決まってくる．そして，この発散点が，古典運動のターニングポイントを表わしている．ただ，厳密には，（与えられたエネルギーをもつ変分問題に対する）適当な無限次元2次形式の負固有値の数を調べるか，または，ターニングポイント近傍のシュレーディンガー方程式を調べなければならない．$G_{\mathrm{WKB}}(x, t\,; y, 0)$に対してその両方を調べてみると，そのフーリエ変換であるエネルギーグリーン関数にはなにも問題がなくて，最終的に

$$\tilde{G}_{\mathrm{WKB}}(x, y; E)=\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^{d/2-1/2}\sum_{\alpha,\beta}\sqrt{|\tilde{D}|}\,e^{-in\pi/2+iW/\hbar} \tag{18-12}$$

と書かれる．ただし，$\tilde{D}$は，上の(18-10)式で与えられ，おのおののWとそれに付

随する量は，指数α，βで指定されているものする．nはターニングポイントの数で，これも，α，βに依存する．

がんばって(18-12)式を導いたので，つぎに，よく知られた公式を求めてみよう．粒子が1次元のポテンシャルの関数の上を運動し，ターニングポイント$x_L(E)$と$x_R(E)$の間で跳ね返され，その区間に閉じこめられているとする．図18-1を見よ．$\tilde{G}_{\mathrm{WKB}}(x, y; E)$の変数$x$と$y$を，古典的に許される領域($x_L \leqslant x$, $y \leqslant x_R$)にとり，さらに，便宜上$y \leqslant x$とする．(18-12)式の総和をとる前に，yからxにいたるエネルギーEの古典経路をすべて列挙しなければならない．これらの経路は，yを出発する際，右へ進むか左へ出るか，また，xに到着するとき，同様に，左右のいずれ側から入るかで，4種類のパターンができる．それぞれの最短のケースを図18-2に示す．この経路のそれぞれに対応して，図18-3に示すように，整数回往復してから，そのパターンに分類される同じエネルギーEの経路が無数個ある．作用積分Wを計算するのに，経路の個別の情報は必要ない．$S(x, y; t)$はハミルトン - ヤコビ方程式を満たすから，Wは，

$$E = H\left(\frac{\partial W}{\partial x}, x\right) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + V(x) \tag{18-13}$$

を満たす．関数

$$w(x, E) = \int_{x_L}^{x} \sqrt{2m(E - V(u))}\, du \tag{18-14}$$

を定義すると，$W(x, y, E)$が

$$W(x, y, E) = \pm w(x, E) \pm w(y, E) + \text{定数} \tag{18-15}$$

の形に書けることは明らかである．ただし，この定数は，積分

$$J = \oint p\, dx = 2w(x_R, E) = 2\int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m(E - V)}\, dx \tag{18-16}$$

の整数倍である．(18-15)式の符号を処理するには，個々の経路のパターンを詳しく見てやればよく，

$$\begin{aligned} W_1(n) &= w(x, E) - w(y, E) + nJ \\ W_2(n) &= w(x, E) + w(y, E) + nJ \\ W_3(n) &= -w(x, E) - w(y, E) + (n+1)J \\ W_4(n) &= -w(x, E) + w(y, E) + (n+1)J \end{aligned} \tag{18-17}$$

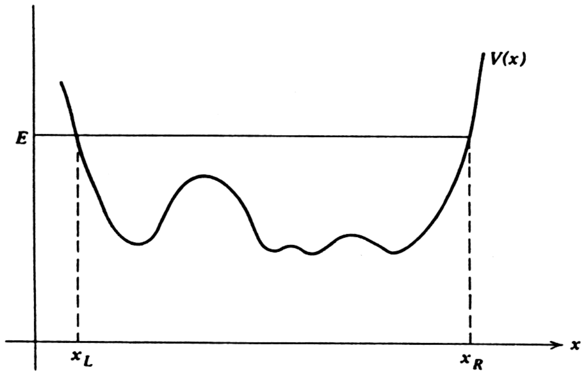


図18-1　ポテンシャルに閉じこめられた同期運動．エネルギーEで，ターニングポイントはx_Lとx_Rにある．

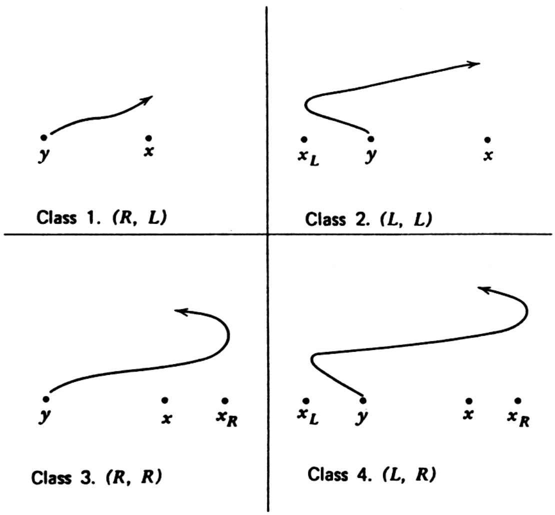


図18-2　yからxへいたる経路．それぞれのクラスの最短経路が1から4に示されている．縦軸は時間．

のようになることが簡単にわかる．ここで$n=0, 1, \ldots$は，図18-2の経路以外によぶんにまわった回数．これら軌道のターニングポイントの数は$2n+n_i$である．ただし，$n_1=0$, $n_2=1$, $n_3=1$, $n_4=2$．(18-12)式の和をとるにあたって，行列式の値を決めなければならない．この行列式で，要素$\partial^2 W/\partial E^2$はいつでも（たとえ2次元以上でも），

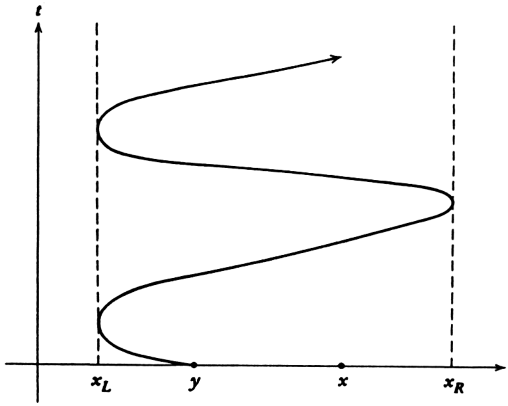


図18-3 図18-2のクラス2に属する経路の1つ.

無視して構わない．というのは，その余因子$\partial^2 W/\partial x \partial y$の行列式がゼロだから．$\partial^2 W/\partial x \partial y$ が正則でないことは，つぎのようにしてわかる．Wが

$$H\left(\frac{\partial W(x, y, E)}{\partial x}, x\right) = E \tag{18-18}$$

を満たすことから，それに$\partial/\partial y$を施して

$$\sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial^2 W}{\partial x_j \partial y_i} = 0 \tag{18-19}$$

を得るが（ここで，i, jは，ベクトルx, yの成分を指定する），量$\partial H/\partial p_i$は速度であって，一般にゼロではない．これで証明できたから，いま調べていた1次元に戻ると，(18-10)式の行列式は $\partial^2 W/\partial x \partial E$ と $\partial^2 W/\partial y \partial E$ の単純積である．このての問題では，絶対値だけを取りだしてきて扱う．これらすべてを総合すると，

$$\tilde{G}_{\mathrm{WKB}}(x, y; E) = \sqrt{\frac{m/2}{\sqrt{(E - V(x))(E - V(y))}}} \times \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(\frac{in J}{\hbar} - in\pi\right) \sum_{i=1}^{4} \exp\left[\frac{iW_i(0)}{\hbar} - \frac{in_i \pi}{2}\right] \tag{18-20}$$

となる．nの和をとると，結局

$$\tilde{G}_{\mathrm{WKB}}(x, y; E) = \frac{(m/2)^{1/2}\left(E - V(x)\right)^{-1/4}\left(E - V(y)\right)^{-1/4}}{1 - \exp\left[(i/\hbar)(J - \hbar\pi)\right]} \times \sum_{j=1}^{4} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(W_j(0) - \frac{n_j \hbar\pi}{2}\right)\right] \tag{18-21}$$

が得られる．プロパゲータ $\tilde{G}(x, y; E)$ は，特異点をもって表わされているから，E が H の点スペクトル（つまり束縛状態）の近くでは，波動関数に関連した留数をともなう極をもつ．具体的には，

$$\tilde{G}(x, y; E) = \frac{i\hbar}{E - E_n}\psi_n(x)\psi_n^*(y) + \text{特異性のない部分} \tag{18-22}$$

の形で書くことができる．(18-21)式の特異点は，

$$1 = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(J - \hbar\pi)\right] \tag{18-23}$$

で起きる．つまり，

$$J = 2\hbar\pi\left(k + \tfrac{1}{2}\right) \qquad k = 0, 1, \ldots \tag{18-24}$$

ただし，J は本来，正定値だから $k \geq 0$．

(18-24)式は，よく知られた半古典論，ボーア - ゾンマーフェルトの量子化条件である．グリーン関数は，しかし，それ以上の情報を含んでいる．極での留数は，

$$\sqrt{\frac{m}{2}}\left(\frac{i\hbar}{\tau}\right)\frac{2\sin\left[\dfrac{w(x, E)}{\hbar} + \dfrac{\pi}{4}\right]}{\left(E - V(x)\right)^{1/4}} \cdot \frac{2\sin\left[\dfrac{w(y, E)}{\hbar} + \dfrac{\pi}{4}\right]}{\left(E - V(y)\right)^{1/4}} \tag{18-25}$$

となる．ただし

$$\tau = 2\int_{x_L}^{x_R} dx \sqrt{\frac{m}{2(E - V(x))}} = \text{一周するのに要する時間} \tag{18-26}$$

である．(18-25)式を半古典論の波動関数とくらべてみてほしい．（たとえば，ランダウ - リフシッツ(Landau-Lifshitz)「量子力学」の(48-3)式．留数は，期待したとおり，波動関数の積になっている．

グリーン関数の t から E への変換以外にも，x から運動量 p への変換も考えられる．これは「位相空間経路積分」に深く関係している．しかし，これに関しては，古典力学の変分原理とモース理論はよくわかっていない．Gutzwiller は，p と E で表示し

たWKB波動関数が，クーロンポテンシャルについては，実際に厳密解と一致することを発見した．（与えられたエネルギーでの）クーロン問題はO(4)の群多様体上での自明なダイナミックスとして再構成できるので，リー群に対しては古典経路の和が厳密解を与える（後述）．Gutzwillerの結果がこの事実に関係しているのか，はっきりわかっていない．この問題全体が，「量子論の対応原理の厳密さ」ということで一般的に特徴づけられる多くの注目すべき性質をもっている．この問題は，Norcliffe等が研究した．

物理の一般の問題では，当然，完全に球対称ではないものをも扱わなければならないことがある．ここに，古典経路の記述と，経路和の両方に問題が生まれてくる．Gutzwillerは，こうしたむずかしい局面を研究するために，ハミルトニアンのスペクトルを経路積分によって調べた．読者には，原論文にあたって，本書では触れていない理論上の発展を直接見ていただきたい．

ここまでは，古典力学的に許容される領域で，波動関数を計算してきた．すなわち，与えられたEに対して(18-2)式に解があり，与えられた端点を結ぶ古典経路が1個以上存在することを仮定していた．

ポテンシャルバリア（障壁，以下単に，バリアともいう）への透過は，与えられたエネルギーに対して古典力学では許されない空間領域でも，波動関数がゼロにはならないという量子現象である．この意味で，光学での回折に似た現象である．バリアの透過にも，WKB解が存在する．経路積分ではどのように記述されるだろうか？

与えられたエネルギーで経路積分は，

$$\tilde{G}(b, a; E) = \int_0^\infty dt \int_{\substack{x(t)=b \\ x(0)=a}} dx(\cdot) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(Et + S[x(\cdot)]\right)\right\} \tag{18-27}$$

の形をとる．バリアの透過あるいは，トンネル現象は，つぎの

$$\delta S = 0 \qquad \text{オイラー - ラグランジュ方程式} \tag{18-28a}$$

$$E + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{18-28b}$$

に，同時に，実数解が存在しないときに起きる．

一番エレガントなのは，複素経路上の経路積分の停留値として，(18-28)式を満たす複素数値経路$x(t)$があればそれを求め，それによって，停留位相近似をまったく同じようにやることであろう．しかし，どうすればよいのか，まだわかっていない

ように思われる．1つできることは，古典経路に沿った作用積分$S(b, a; t)$を含む，時間依存のWKB表現を使ったプロパゲータを近似することである．すると，欠けているのは(18-28b)式だけということになるが，複素時間に入ることによって停留値がひろえるように，$\int_0^\infty dt$の積分を動かすことができる．MacLaughlinはこうやって，多くのWKB解を再発見した．私は，WKB解を再構成するという意味では，この方法は成功すべくして成功していると思う．というのは，$S(b, a; t)$の解析接続は，それがもともと解になっているハミルトン - ヤコビ方程式の解析接続と関連しているからだ．しかし，ハミルトン - ヤコビ方程式は，シュレーディンガー方程式を変形して，$\hbar\to 0$の極限での最大の寄与を捜すなかで得られるものである．したがって，いくら経路積分から出発したといっても，ひとたびWKB近似の上に乗っかってしまったからには，そのすべての（時間軸上での）解析接続はハミルトン - ヤコビ方程式の解，すなわちシュレーディンガー方程式の$\hbar$の最低次の項の寄与を与えるはずだ．(24章のノートを見よ．)

トンネル現象の別の見方として，一般化した古典力学に対する解としての，正真正銘の経路を求めるというやりかたがある（28章参照）．そこでは，$t\to -it$の結果(これはファインマン - カッツ公式を見たときと同じ変換)，ポテンシャルVは$-V$となる．

演習：　この章の方法を使って，幅aの無限に深い井戸型ポテンシャルの中に閉じこめられた粒子の，グリーン関数，固有値，固有関数を求めよ．また，時間依存のプロパゲータをつくれ．

解への注意：　ターニングポイントで，このポテンシャルを有限の傾きの直線で近似することはできないから［これは，積分(18-11)式の解析的なふるまいに影響する］，ターニングポイントを通過する際のプロパゲータの位相の変化は，$\pi/2$とはならない．すべての波動関数が壁でゼロとなるようにグリーン関数を書き下ろすには，位相変化は，むしろπとならなければならない．堅い壁が1枚の場合については，(6-43)式以下の議論を見よ．(18-20)式は，したがって，

$$\tilde{G}\sim\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(\frac{in\,J}{\hbar}-2in\pi\right)\sum_{k=1}^{4}\exp\left(\frac{iW_k(0)}{\hbar}-in_k\pi\right)$$

となる．$2ni\pi$は落してもよい．ここで定義したn_kのために，まさに，壁でのxとy

で$\tilde{G}$がゼロになる．Vは$0\leqslant x\leqslant a$で定数だから，$J=2a\sqrt{2mE}$ がなりたち，nでの和をとると，$J/\hbar=2\nu\pi\,(\nu=1,\,2,\,\ldots)$に極を与える．よって，

$$E=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\nu\pi}{a}\right)^2,\qquad \nu=1,2,\ldots$$

が，量子化されたエネルギー順位である．$W_k(0)$，$k=1,\,\ldots,\,4$を計算すると，通常の，井戸型ポテンシャルの波動関数が得られる．

時間依存のプロパゲータがちょうど，ヤコビのテータ関数になっていることは，簡単に調べることができる．テータ関数の基本的な恒等式，(23-12)式，を使うと，$G(x,t;y)$の簡単な表現が，壁から何回跳ね返されたかという古典経路で表わされる．これは，鏡像の方法を使ってもいえる．[7章，演習3，p.46を見よ.]

ノート

この章でやった多くの計算は

M. C. Gutzwiller, Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom, *J. Math. Phys*. **8**, 1979 (1967)

M. C. Gutzwiller, Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom II, *J. Math. Phys*. **10**, 1004 (1969)

M. C. Gutzwiller ,Energy Spectrum According to Classical Mechanics, *J. Math. Phys*. **11**,1791 (1970)

M. C. Gutzwiller, Periodic Orbits and Classical Quantization, *J. Math. Phys*. **12**, 343 (1971)

に見られる．これらの論文は，ここで示したことよりはるか先まで進んでいる．クーロンポテンシャルに対してWKB近似が厳密解に一致すること，およびそれからの帰結は，A. Norcliffe, I.C. Percival, M.J. Roberts によって「対応原理の恒等式」という名のもとに，研究された．その総合報告が

A. Norcliffe, Correspondence Identities and the Coulomb Potential, *Case Studies in Atomic Physics* **4**, 1 (1973), North Holland

にある．クーロンポテンシャルの特別な性質については，

M. Bander and C.Itzykson, Group Theory and the Hydrogen Atom.I, *Rev. Mod. Phys*. 38, 330(1966) ; II, *Rev. Mod. phys*. **38**, 346 (1966)

を見るとよい．トンネル現象と経路積分については，

D. W. McLaughlin, Complex Time, Contour Independent Path Integrals and Barrier Penetration, *J. Math. Phys.***13**, 1099 (1972)

で議論されている．MacLaughlinは，いくつも具体的な例を解いているが，彼の方法では，特に，時間軸での解析接続が重要である．複素経路のアイデア，および，より一般的には，光の回折と直進という見かけ上相反する考えを統一することは，光学での

J. B. Keller, A Geometrical Theory of Diffraction,in *Calculus of Variations and its Applications*, L. M. Graves, Ed., McGraw-Hill, New York, 1958

J. B. Keller, Geometrical Theory of Diffraction, *J. Opt. Soc. Amer.* **52**, 116 (19

に由来している．

19章　散乱理論

経路積分の半古典近似が，特に有用だとわかっている領域が散乱理論である．経路積分の言葉で散乱理論がはじめて定式化されたのは，原子衝突に関連してであるが，高エネルギー（大きい量子数）の重イオン衝突を通して，原子核物理への応用に広がっていった．

S-行列は，

$$\langle p''|\mathbf{S}|p'\rangle=\lim_{\substack{t'\to-\infty\\ t''\to+\infty}}\left\langle p''\left|\exp\left(\frac{iH_0t''}{\hbar}\right)\exp\left[\frac{-iH(t''-t')}{\hbar}\right]\exp\left(\frac{-iH_0t'}{\hbar}\right)\right|p'\right\rangle \tag{19-1}$$

で定義される．ここで，H_0は自由粒子のハミルトニアンで，Hには相互作用が含まれている．簡単のため，粒子は，スピンをもたないとしておこう．実際の大部分の物理的対象では，そんなわけにはいかないが．(19-1)式のH_0については，自明で，運動量p''とp'に対して，それぞれ，E''とE'を与える．残るのは，経路積分のフーリエ変換のみで，すなわち，

$$\langle p''|\mathbf{S}|p'\rangle=\lim\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E''t''-E't')\right]\int dx'\,dx''\,\frac{1}{2\pi}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'x'-p''x'')\right]$$
$$\times\left\langle x''\left|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t''-t')\right]\right|x'\right\rangle \tag{19.2}$$

を評価しなければならない．最後の行列要素は，経路積分で

$$G\equiv\left\langle x''\left|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t''-t')\right]\right|x'\right\rangle=\int dx(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''}\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(x)\right)d\tau\right] \tag{19-3}$$

と表わされ，いつものように半古典近似

$$G=\sum_\alpha\sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2S_\alpha}{\partial x_i''\partial x_j'}\right)}\;e^{iS[x_\alpha]/\hbar} \tag{19-4}$$

が使える．ここで，x_αは，オイラー - ラグランジュ方程式の解である古典経路で，(x', t')と(x'', t'')を結ぶ．$S(x_\alpha)$はその作用積分．x'とx''の積分も停留位相近似で処理することができる．たとえば，x'の積分の大部分の寄与は

$$\frac{\partial}{\partial x'}[p'x' + S_\alpha] = 0$$

を満たすx'からくる．これは，もちろん，古典経路の性質の1つ

$$p' = -\frac{\partial S}{\partial x'} \tag{19-5}$$

そのものである．(19-5)式は，

$$p'' = \frac{\partial S}{\partial x''} \tag{19-6}$$

と一緒に満たす．これらから，与えられた境界条件p'とp''を満たす，古典力学的な端点の組みあわせ$\bar{x}'$と$\bar{x}''$がわかる．これは，$\hbar$のオーダーで，正準変換をやったことにすぎない．(19-4)式の根号の部分は，ゆっくりとしか変わらないので，積分の外に出すと，

$$\begin{aligned}\langle p''|\mathsf{S}|p'\rangle = \lim_{t', t''} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E''t'' - E't')\right] \sum_\alpha \sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_\alpha}{\partial x''\partial x'}\right)} \\ \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(S_\alpha + p'\bar{x}' - p''\bar{x}'')\right] \int d(x'' - \bar{x}'')\, d(x' - \bar{x}') \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\partial^2 S}{\partial x'^2}(x' - \bar{x}')^2 + \cdots\right]\right\}\end{aligned} \tag{19-7}$$

と書くことができる．このガウス積分は，根号のなかの因子を，作用積分の運動量についての2階微分に変える．作用積分S_αは

$$S_\alpha = \int (p\,dx - H\,dt)$$

と書くことができる．古典経路については，Hは定数$E_{\alpha'}$で，部分積分$\int p dx = px|_{x'}^{x''} - \int x dp$を使うと，Sは，

$$\begin{aligned}\langle p''|\mathsf{S}|p'\rangle = \lim_{t'', t'} \sum_\alpha \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[(E'' - E_\alpha)t'' - (E' - E_\alpha)t']\right\} \\ \times \sqrt{\det\left(\frac{\partial^2 F_\alpha(p'', p')}{\partial p''\partial p'}\right)}\, e^{(i/\hbar)F_\alpha(p'', p')}\end{aligned} \tag{19-8}$$

となる．ここで，

$$F_\alpha(p'', p') = -\int x\,dp \tag{19-9}$$

で，この積分は古典経路に沿って行なう．ここで，散乱理論で通常に行なわれる考えにしたがって，波束がつくられているものとしよう．必要に応じて，数学的な収束性を保証するためである．（エネルギー）幅の狭い波束でSを挟むと，$E_\alpha = E' = E''$になる．ここから出るデルタ関数を無視して，Sを

$$\langle p''|\mathrm{S}|p'\rangle = \sum_\alpha \sqrt{\det\left(\frac{\partial^2 F_\alpha}{\partial p' \partial p''}\right)}\; e^{iF_\alpha/\hbar} \tag{19-10}$$

と書く．

ここでは，いちばん簡単な例を使って，この定式化の詳細を考える．しかし，実際の応用面でも(19-10)式は，広く使われていることを指摘しておく．

互いに衝突する2つの原子があるとしよう．その相対運動のエネルギーが，半古典領域に十分入っていることがよくある．原子のなかの電子は速く（量子論的に）運動するので，そこを別途詳しく見てやって，原子間の有効ポテンシャルをつくることができる．原子核のイオン - イオン衝突だと，さらに一歩進むことができる．個々の核子の間に，調和振動子の座標でよく記述される集団運動が存在する．核子の古典的な自由度を第一原理的に（原子の場合のようにボルン - オッペンハイマー型の近似ではなく）とり扱えるように，これら集団運動の座標を古典作用積分にくりいれることができる．

これらは，専門家だけに興味がもたれるたぐいの問題のように見えるが（章末の文献参照），実際問題を扱う段階で，一般的に魅力があるアイデアを編みだすことが必要になることがある．トンネル現象での解析接続などもその例である．

いまから理論を説明するためにとりあげる例は，応用を目指したものではない．特に，非弾性衝突や，複素ポテンシャル，そこに現われる経路などを扱うための理論の細かいことはいっさい考えない．にもかかわらず，この例を通して古典的トンネルの意味が少なからず明らかになる．

1次元の反転した井戸型のポテンシャル

$$V(x) = U\theta\left(\frac{a}{2} - |x|\right) \tag{19-11}$$

を考えよう．左側から入射してくる粒子の運動量を$\hbar k$とせよ．古典力学では，もし$V < \hbar^2 k^2/2m$なら，粒子は右側へ通り抜けていってしまう．ただし，井戸の上では，運

動量$\hbar K$は，

$$k^2 = K^2 + \frac{2mU}{\hbar^2} \equiv K^2 + \lambda \tag{19-12}$$

となるが，この式で，λを定義しておこう．(19-9)式の積分をするために，関数

$$p(t) = \hbar k + \hbar(K-k)\theta(t-T_1)\theta(T_2-t) \tag{19-13}$$

を考える．ここで，T_1は粒子が井戸にさしかかる時刻，T_2はそこを抜けでる時刻である．$p(t)$は，運動量座標上での古典運動である．dp/dtは，$t=T_1$とT_2を除いてゼロだから，xについての必要な情報は，

$$x(T_1) = -\frac{a}{2}$$
$$x(T_2) = \frac{a}{2}$$

だけである．pの微分は，t上で1組みのデルタ関数を与えるから，明らかに

$$\frac{1}{\hbar}F = \frac{-1}{\hbar}\int x\frac{dp}{dt}dt = (-1)\left[\left(\frac{-a}{2}\right)(K-k) + \frac{a}{2}(K-k)(-1)\right]$$
$$= a(K-k) = a\left[\sqrt{k^2-\lambda} - k\right] \tag{19-14}$$

となる．(19-10)式によって，これは散乱による位相のずれである．この場合の厳密な位相のずれδは（どんな量子力学の教科書にも載っている），

$$k\tan\left(\frac{Ka}{2}\right) = k\tan\left(\frac{ka}{2} - \delta\right) \tag{19-15}$$

の解として得られる．kaとλ/k^2がともに小さければ，(19-15)式と(19-14)式の一致はよい．しかし，その他のパラメータの値では，結果は一致しえず，その差は定性的なレベルにまで達する．$a\to 0$，$U\to -\infty$，$aU\to$constと変えて，(19-11)式のポテンシャルを引力的なデルタ関数に変えてみよう．この場合，量子力学では有限の位相のずれがあるのに，半古典近似では完全にゼロ，つまりポテンシャルがあたかも透明であるかのように突き抜ける．

(19-14)式のもう1つの帰結は，トンネル現象あるいはバリアへの波動関数のしみこみである．Uを大きな正値とせよ．すると，$F/\hbar$は虚数成分をもつようになる．分岐の切断を

$$\mathrm{Re}\left(\frac{iF}{\hbar}\right) = -a\sqrt{\lambda - k^2} \tag{19-16}$$

のように選ぶ．これはまさに，トンネルに対するWKB近似である．(19-16)式は，

解析接続によって得た．その際，接続が適切に行なわれるように変数を選んだ，つまりλやk^2である．時間tやその他の変数で接続することによって，別の半古典論をつくることもできる．基本的には，停留位相近似をしているのだが，トンネル現象では，被積分関数の停留値が積分領域の外にある．解析接続は，離れた停留点をとりこむように積分経路を変形させることをやっているに等しい．この延長線でいちばん興味深いのは，(19-3)式で要求されているのは複素経路$x(\tau)$だから，経路積分の積分領域を複素経路まで含めるように変形させてみたら，というアイデアである．私が知っている範囲では前にも注意したように，このアイデアをどうやって実現してよいのかわかっていない．

ノート

S-行列［(19-1)式］については，

R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York, 1966, Sec. 6. 3

を見よ．井戸型ポテンシャルについての散乱の位相のずれは，

R. H. Dicke and J. P. Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1960

にある．散乱理論と経路積分に関する文献として

P. Pechukas, Time Dependent Semiclassical Scatteing Theory, I, Potential Scattering, *Phys. Rev.* **181**, 166 (1969) ; II, Atomic Collisions, *Phys. Rev.* **181**, 174 (1969)

D. Gelman and L.Spruch, Feynman Path Integrals and Scattering Theory, *J. Math. Phys.* **10**, 2240 (1969)

A. P. Penner and R.Wallace,Semiclassical Collision Theory within the Feynman Path-Integral Formalism, *Phys. Rev. A* **7**, 1007 (1973) ; Application to Vibrational Excicitation, *Phys, Rev A* **9**, 1136 (1974)

W. H. Miller, Semiclassical Theory of Atmo-Diatom Colisions : Path Integrals and the Classical S-Matrix, *J. Chem. Phys.* **53** 1949(1970) ; Classical S-Matrix : Numerical Application to Inelastic Collisions, *J. Chem. Phys.* **53** 3578 (1970) ; *Adv. Chem. Phys.* **25,** 69 (1974)

W. H. Miller and T.F.George, Analytic Continuation of Classical Mechanics for Classically Forbidden Processes, *J. Chem. Phys.* **56**, 5668 (1972)

を挙げておく．Miller と George が指摘したところによると，1次元では，座標でな

い1つの変数（われわれのλやk^2のような）を使って解析接続することができたとしたも，多次元では，同じようには実現不可能である可能性がある．多次元では1つの複素化したパラメータだけでは，バリアを迂回するような経路を見つけることが困難だからである．

原子核物理で，いろいろな方法論を詳細に比較した総合報告

W. B. Campbell, P. Finkler, C. E. Jones, and M.N.Misheloff, Path-Integral Formulation of Scattering Theory, *Phys. Rev. D* **12**, 2363 (1975)

T. Koeling and R. A. Malfliet, Semi-classical Approximations to Heavy Ion Scattering Based on the Feynman Path-Integral Method, *Physics Reports* **22**, 181 (1975)

がある．この著者らは，特に，複素ポテンシャルによる散乱に関心があって，それを高精度に近似する「古典経路」を考えている．

S. Levit, U. Smilansky, and D.Pelte,A New Semi-Classical Theory for Multiple Coulomb Excitation, *Phys. Lett.* **53B**, 39 (1974)

S. Levit and U. Smilansky, A New Approach to Gaussian Path Integrals and the Evaluation of the Semi-Classical Propagator, *Ann.Phys.* **103**, 198 (1977)

これらの論文は，核物理を念頭において，コースティクスや焦点の問題を扱っている．虹散乱やグローリー散乱は，Pechukasにもとりあげられている（上を見よ）．

バリアへの透過と複素ポテンシャルは，D.W. MacLaughlinによって，1970年のインディアナ大学の学位論文で研究され，論文として

D. W. McLaughlin, *J. Math. Phys.* **13**, 1099 (1972)

に出版された．彼は，反転した放物線型ポテンシャル（MillerとGeorgeもそうだが）と他のいくつかの例を調べている．より伝統的な，経路積分を使わないWKB近似で複素経路を扱う例は

J. Knoll and R. Schaeffer, Semiclassical Scattering Theory with Complex Trajectories, I, Elastic Waves, *Ann. Phys.* **97**, 307 (1976)

に載っている．この線に沿った別のものとして

R. Balian and C. Bloch, Solution of the Schrodinger Equation in Terms of Classical Paths, *Ann. Phys.* **85**, 514 (1974)

がある．トンネルに対して古典力学を使うのと同じように，回折についても

J. B. Keller, Geometrical Theory of Diffraction, *J. Opt. Soc.* **52**, 116 (1962)

を参照されたい．

20章　幾何光学

数学的にいうと，電磁気学とスピンなしの粒子のための量子力学は，2つの点で異なっている．1つは，電磁場は，ベクトル場だということ．2番目に，電磁気学は，時間について2階微分を含む偏微分方程式，実際には双曲型の偏微分方程式を満たすが，量子力学は，時間に関する1階の放物型である．経路積分に関するかぎり，電磁場のベクトル的性質は，実際，つごうのよいものではない．電磁場の経路積分が直面する問題は，スピンをもった粒子の量子力学のための経路積分（本書のあとのほうで議論する）がもつ問題点と基本的に同じようなことである．しかしここでは，電磁場を扱うのに，スカラー量として処理する．こうやって単純化しても，光学の有用な知見がたくさん得られる（ここでは，電磁波の波動方程式を議論しようとしているのであって，電磁場の第2量子化をしようとしているわけではないことに注意．それは，また別の話である）．

電磁場が時間に関して2階の波動方程式を満たすということは，ある種の形式的な論理で見いだすことができるが，それは，Feynmanがクライン‐ゴードン(Klein-Gordon)方程式を量子化した方法（25章)をほうふつとさせる．

さて，空間的にゆっくり変化する屈折率$n(x)$をもつ媒質のなかを進行する，自由な電磁輻射を考えよう．スカラーの電磁場$u(x,\ t)$は，方程式

$$\frac{n(x)^2}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\nabla^2 u=0 \tag{20-1}$$

を満たす．決まった周波数ωをもつ波動，つまり

$$u(x,t)=u(x)\exp(-i\omega t) \tag{20-2}$$

と書くことができる波動だけを考えよう．以後，出てくる幾何光学に使われる近似では，どんなパラメータが大きくなりそうか，定義する段階で特に注意をはらっておく必要がある．実際，系を特徴づける長さは，光の波長より長い．したがって，xを光の波長を単位として測ったとすると，大きな値となるから，量

$$x=By\frac{c}{\omega} \tag{20-3}$$

を定義しておくとつごうがよい．ここで，yは，系の特徴的な長さを反映する単位で測った新しい変数であり，$B\to\infty$は幾何光学極限である．これらの式をあわせると，

$$-\frac{\omega^2}{c^2}[n(x)]^2u-\frac{\omega^2}{c^2}\frac{1}{B^2}\nabla_y^2u=0 \tag{20-4}$$

と書き直される．ただし，$\nabla_y^2=\partial^2/\partial {y_1}^2+\partial^2/\partial {y_2}^2+\partial^2/\partial {y_3}^2$．説明のつごう上，$E$をある定数として（真空では$E=1$），$x\to\infty$で$n(x)^2\to E$となるような状況を考えるものとする．いま，

$$V(y)=E-n(x)^2 \tag{20-5}$$

を定義する．すると，(20-4)式は

$$-\frac{1}{B^2}\nabla_y^2u+V(y)u=Eu \tag{20-6}$$

と書き直される．どうだろう，シュレーディンガー方程式に似てきたな，と思いませんか．つぎの変換は，人工的な感じがするが，目的を達成するためには必要なものである．しかし，Feynmanがクライン - ゴードン粒子を扱った方法を思い浮かべると，あながち予想されない方法ではない．

$$\psi(y,\tau)=e^{-iE\tau B}u(y) \tag{20-7}$$

と置く．関数ψは，

$$-\frac{1}{B^2}\nabla_y^2\psi+V\psi=\frac{i}{B}\frac{\partial\psi}{\partial\tau} \tag{20-8}$$

を満たす．もう，こうなると，時間依存のシュレーディンガー方程式と同じ格好をしているのは明らかだ．さらに，$\hbar\to 0$，$B\to\infty$としてやれば，両者は形式的に一致してしまう．一方，(20-8)式から(20-6)式の解に戻すには，

$$u(y)=\int_{-\infty}^{\infty}d\tau\exp(iE\tau B)\psi(y,\tau) \tag{20-9}$$

を積分すればよい．

この段階でもψの経路積分解を書き下ろすことができるけれども，概念的に明確になることがあるので，(20-6)式に戻ろう．(7-8)式にと同じように，グリーン関数，すなわち

$$\left[-\frac{1}{B^2}\nabla_b^2+V(b)-E\right]\tilde{G}(b,a;E)=-\frac{i}{B}\delta(b-a) \tag{20-10}$$

の解を考える．7章と同じように，$\mathrm{Im}\,E>0$ が，必要ならばいつでも収束因子を与える．$\tilde{G}(b,a;E)$ は，点光源 a からの光が b に届いているという意味で，光学問題の解を表わしている．一方，これは，散乱問題，すなわち，与えられた入射波に対する散乱波を計算する問題にも応用することができる．まさに，量子力学的散乱理論のリップマン - シュヴィンガー(Lippmann-Schwinger) 方程式みたいなものだ．

ここでは，われわれのやり方ははっきりしている．時間に依存しないグリーン関数 $\tilde{G}(b,a;E)$ は，7章でやったようにフーリエ積分を行なえばよい．ただし，(20-9) 式のように $-\infty$ から ∞ ではなく，$0\leqslant\tau\leqslant\infty$ の範囲で行なう．時間依存のグリーン関数は，経路積分で与えられるから，結局

$$\tilde{G}(b,a;E)=\int_0^{\infty}d\tau\, e^{iE\tau B}\int_{(a,0)}^{(b,\tau)}dy(\cdot)\exp(iBS[y(\cdot)]) \tag{20-11}$$

となる．ただし，

$$S[y(\cdot)]=\int_0^{\tau}\left[\frac{1}{4}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2-V(y)\right]d\tau' \tag{20-12}$$

だが，ここで，記号 $dy(\cdot)$ は，「経路空間の体積」を表わす．$y(0)=a$，$y(\tau)=b$ を満たす経路についてのみ，和をとる．もちろん，$1/\hbar$ は，すべて，B に置きかわっている．

(20-11) 式の多重積分で，大きな B に対しては，停留位相近似を使うことができる．積分は，τ と $y(\cdot)$ について行なうが，指数関数の肩の変数は

$$iB\left[E\tau+\int_0^{\tau}\left[\frac{1}{4}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2-V(y)\right]d\tau'\right] \tag{20-13}$$

である．これが，τ と $y(\cdot)$ の両方について定常とならなければならない．$y(\cdot)$ について変分をとると，オイラー - ラグランジュ方程式が出て，数理的に導入された変数 τ のなかで，「古典経路」$\bar{y}(\tau)$ を与える．一方，(20-13) 式を τ で変分すると，

$$E+\frac{\partial S}{\partial\tau}=E-\left[\frac{1}{4}\left(\frac{dy}{d\tau}\right)^2+V\right]=0 \tag{20-14}$$

が得られる．この式は，「エネルギー」が経路 $\bar{y}$ に沿って保存され，それがちょうど，E だといっている[次頁脚注(1)]．

物理的でない変数τを用いないで$y(\tau)$の変分原理を定式化するために，(20-14)式を利用して，(20-13)式を

$$E\tau+\int_0^{\tau}\left[\frac{1}{4}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2-V\right]d\tau'=\int_0^{\tau}\frac{1}{2}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2 d\tau\equiv A \tag{20-15}$$

と書き直す．すると，すべてのτ'に対して

$$\frac{1}{4}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2+V=E \tag{20-16}$$

を満たす．aを出発しbに到着する（到着時間τが変わるのを許すものとする）経路のうちで，古典経路$\bar{y}(\cdot)$は，つぎの量

$$A=\int_0^{\tau}\frac{1}{2}\left(\frac{dy}{d\tau'}\right)^2 d\tau' \tag{20-17}$$

を停留値にする経路である．τを変化させることができる自由度は，(20-16)式を制限条件として，(20-14)式がτを決定する条件式となる，ということからきている．

ここでの定式化は，マーペルテュイ(Maupertuis)の変分原理によるものである．理論からτを除くために，$y(s')$に沿った弧の長さds'が

$$ds'=\sqrt{\left(\frac{dy_1}{d\tau'}\right)^2+\left(\frac{dy_2}{d\tau'}\right)^2+\left(\frac{dy_3}{d\tau'}\right)^2}\ d\tau' \tag{20-18}$$

であることに注意する．もちろん，これはτには依存しない．さらに，(20-16)式は，

$$\left(\frac{d\mathbf{y}}{d\tau'}\right)^2=4(E-V) \tag{20-19}$$

と書くことができる．以上，置きかえて，

$$A=\int_0^{s}\sqrt{E-V}\ ds' \tag{20-20}$$

となる．積分の上限sは，物理的空間での経路の長さである．ここで，Vの定義，すなわち(20-5)式を思いだすと，$(E-V)^{1/2}$は$n(x)$であり，それは媒質中での局所的な光の速度の逆数$1/v(x)$に比例する．

結論は，つぎの通りである．点光源aから出た光が，点bで輝いて見える場合の，

脚注(1)　$\partial S/\partial\tau$は，読者が予想されるように，Lではなくて，$-H=-[(1/4)(dy/d\tau)^2+V]$である．これは，$\tau$を変化させる際に，それに沿って(20-13)式の積分を評価すべき古典経路のほうも変化するからだ．

最大の寄与をなす経路$x(s')$（弧の長さs'がパラメータとなるが，その最大長は決まっていないとする）は，積分

$$T = \int_0^s \frac{1}{v(x)} ds' \tag{20-21}$$

を停留値にする経路である．

これこそ，フェルマー(Fermat)の原理である．つまり，Tは光線の届く時間であって，それが最小の（実際には，極値の）経路を要求する．

いくつかコメントしておこう．まず，実際には，停留値の経路1本だけが最大の寄与をするというわけではなく，その近傍の経路の集合が重要なのである．2番目に，停留値の経路のまわりのガウス積分が，光線密度を与えるということである．これは応用上，重要である．3番目に，干渉や回折の全領域が，いまの理論で扱うことができるということである．2つ以上の停留解があれば，そこに干渉が生ずる．それらの解が近ければ，焦点やコースティクスが現われる．これは，本書の別の章でやったこととまったく同じことである．最後に，たまたま解が存在しなくて，複素時間や複素経路への解析接続をして初めて停留解が見つかったとする．こういう複素経路は，幾何学的な回折理論との関連を示唆している．もし，経路積分の停留位相近似に形式論理以上のものを求めていくならば，ゆく手には，かなりの有用な数学が待ち受けているはずである．

ノート

本章での，理論の誘導やそれに類似した方法は，きっと経路積分の初期の頃から知られていたに違いないとは思う．したがって，私が展開したやり方がオリジナルとは思わないが，もとになっているものがあるわけでもないし，少なくとも私は，そういうものの存在を知らない．1つだけ，よく似たやり方が，

M. Eve, The Use of Path Integrals in Guided Wave Theory, *Proc. Poy. Soc. Lond. A* **347**, 405 (1976)

にある．幾何光学には，もちろん，大量の文献がある．結局のところ，その数学的基礎づけは停留位相近似である．完全かつバランスのとれた文献紹介はできようもないが，つぎの論文は，少なくとも，興味をもった読者に，さらに深く調べる手がかりを与えてくれると思う．

C. S. Morawetz and D. Ludwig, An Inequality for the Reduced Wave Oprator and the Justification of Geometrical Optics,*Comm.Pure and Appl. Math.* **21**, 187

(1968)

D. Ludwig, Uniform Asymptotic Expansions at a Caustic, *Comm. Pure and Appl. Math*. **19**, 215 (1966)

R. A. Handelsman and N. Bleistein, Asymptotic Expansions of Integral Transforms with Oscillatory Kernels : A Generalization of the Method Stationary Phase, *SIAM J. Math. Anal*. **4**, 519 (1973)

「幾何学的回折」, それは自己矛盾のような言葉ではあるが

J. B. Keller, Geometrical Theory of Diffraction, *J. Opt. Soc*. **52**, 116 (1962)

に説明されている. Kellerは, 光学の方法を回折現象の解析に使う方法を編みだしたが, その方法を深く理解するには, 本章で説明した種類の経路積分がよいと思う.

21章　ポーラロン

電子は極性の固体中を運動するとき，そのまわりのイオンの位置をゆがめる．その結果，電子のエネルギーは下がり，有効質量が増加する．結晶格子のゆがみは，フォノンの生成を引き起こすから，この問題を，電子とフォノン場との相互作用ととらえることができる．物理的に重要なのは，高い振動数からの寄与，つまり「光学」モードで，これらがすべて同じ振動数をもつと仮定すると便利である．しかも，明らかに悪い近似ということもない．

この問題に経路積分を応用することは，歴史的には，Feynman自身の初期の研究に始まった．この応用は，いくつかの点で，意義が深い．まず，それ自身，固体物理学で興味ある対象になっていること．2番目に，粒子が場と相互作用する，いちばん簡単な例になっているということである．粒子は，量子場の理論でいう，最高のファッションに身を包んだ，「衣を着た粒子」になっている．そのデリケートな数学的鋭敏さのために，量子電気力学の研究者をがっかりさせていた質量のくりこみ理論が，ここでは，不思議な発散もなく成功してしまう．電子は実際，励起したフォノン場のなかを移動するが，裸の質量も，くりこまれた質量も，ともに完全に定義することができる．ポーラロン問題が特によかった理由の3番目として，経路積分のもっとも有効な利用方法を具体的に教えてくれることにある．いま，2つの系，XとYがあって，相互作用しているとする．経路積分を使って一方の系を完全に解き，残りの項を，もう一方の系に押しつけることにする．すると，プロパゲータは，残されたほうだけの，自己相互作用を含むものとなる．こうして，経路積分は，

$$G=\int dX(\cdot)\,dY(\cdot)\exp\left\{-\int L_X-\int L_Y-\int L_I\right\}$$

の形をとる．ここで，L_XとL_Yは，それぞれ，XとYの独立のラグランジアンであり，L_Iは，相互作用を表わす．$\int dY(\cdot)\exp\{-\int L_Y-\int L_I\}$は厳密に実行でき，$g(X)\equiv\exp(-V(X))$が与えられるとしよう．すると，$G$は，新しい相互作用項$V(X)$を含む，$X$だけの経路積分になる．これは，$Y$が調和振動子のときがいちばん有効である．しかし，相互作用には，この章で扱う例のほかに，電子‐格子相互作用が含まれている．

結果として，導かれる電子の自己相互作用は，電気力学的力の遠距離作用に対応するラグランジアンと同じものになる．

分極可能な連続体の固体を考えよう．電子の位置と運動量を，それぞれ，r，pとする．質量m，これは，静止した格子から受けるポテンシャルのなかでの有効質量といってよいが，それを1にとる．ここであつらえた単位は，光学的なフォノンの振動子ωを1つだけに仮定し，それも1とする．また，$\hbar=1$とする．重要な物理的パラメータとして，電子が格子をどの程度ゆがめることができるかということを表わす結合定数αがある．通常の次元をもつ量を使って，αは，

$$\alpha=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right)\frac{e^2}{\hbar\omega}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$$

と表わされる．ここで，εとε_∞は，それぞれ，静止場と高振動場での誘電率である．αの典型的な大きさは，1から20の間ぐらいである．kをフォノンの波数とし，その座標p_kとq_kを，固体の振動子を第2量子化した場の生成・消滅演算子を使って，通常のやり方で定義する．これらの量から，ハミルトニアンは，

$$H=\tfrac{1}{2}p^2+\tfrac{1}{2}\sum_k\left(p_k^2+q_k^2\right)+\left(2\sqrt{2}\,\pi\alpha\right)^{1/2}\sum_k\frac{1}{k}q_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{21-1}$$

と書くことができる．ただし，$\sum_k$は$\int d^3k/(2\pi)^3$の意．(21-1)式に対応して，ラグランジアン

$$L=\tfrac{1}{2}\dot{r}^2+\tfrac{1}{2}\sum_k\left(\dot{q}_k^2-q_k^2\right)-\left(2\sqrt{2}\,\pi\alpha\right)^{1/2}\sum_k\frac{1}{k}q_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{21-2}$$

が生ずる．

われわれの目的は，ファインマン - カッツ公式を使って，基底状態のエネルギーを計算することである．この公式を使うために，虚数時間に入って，

$$G(x,-i\hbar T;y,0)=\sum_\alpha e^{-E_\alpha T}\psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(y) \tag{21-3}$$

を調べ，これから

$$E_0=\lim_{T\to\infty}\left(-\frac{1}{T}\right)\log G(x,-i\hbar T;y,0) \tag{21-4}$$

を得る．$L=(1/2)\Sigma m_i\dot{x}_i{}^2-V(x)$および$\hbar=1$のとき，$G$の経路積分表示は

$$G(-iT)=\sum_{\text{paths}}\exp\left\{-\int_0^T d\tau\left[\tfrac{1}{2}\sum m_i\dot{x}_i^2+V(x)\right]\right\} \tag{21-5}$$

となる．上の被積分関数が，単にハミルトニアンになっていることに注意．したがって，

$$G=\int dr(\cdot)\int\prod_k dq_k(\cdot)\exp\left\{-\int_0^T dt\left[\tfrac{1}{2}\dot{r}^2+\tfrac{1}{2}\sum\left(\dot{q}_k^2+q_k^2\right)\right.\right.$$
$$\left.\left.+(2\sqrt{2}\,\pi\alpha)^{1/2}\sum_k\frac{1}{k}q_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right]\right\} \tag{21-6}$$

を適当な端点に対して評価することに帰着した．ここで，r'，q'_kと，r''，q''_kを，それぞれ，始点と終点とした．

さて，ここで，前に述べたテクニックを使う．相互作用する場と粒子を引き離して，一方が完全に解けるようにする．そこで，qについて積分することで，この変数を消去する．

q_kの1つについて経路積分

$$\int_{(q',0)}^{(q'',T)}dq(\tau)\exp\left\{-\int_0^T\left[\frac{1}{2}(\dot{q}^2+q^2)+q\gamma(\tau)\right]d\tau\right\} \tag{21-7}$$

を考える．便宜上，下つき文字kを省く．この式で

$$\gamma(\tau)=(2\sqrt{2}\,\pi\alpha)^{1/2}\frac{\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(\tau))}{k} \tag{21-8}$$

である．任意の力をもつ，2次のラグランジアンの経路積分は，6章でやった[(6-36)式，(6-41)式，(6-42)式を見よ]．結果は（虚数時間では），

$$[2\pi\sinh T]^{-1/2}\exp(-S_c)$$

で，ここで，

$$S_c=(2\sinh T)^{-1}$$
$$\times\left[(q'^2+q''^2)\cosh T-2q'q''+2q''\int_0^T\gamma(t)\sinh t\,dt\right.$$
$$\left.+2q'\int_0^T\gamma(t)\sinh(T-t)\,dt-2\int_0^T dt\int_0^t ds\,\gamma(t)\gamma(s)\sinh(T-t)\sinh s\right] \tag{21-9}$$

である．ファインマン-カッツ公式を使ってわれわれが求めたいものは，波動関数がゼロとはならない点でのプロパゲータである．調和振動子(q_k)の基底状態におけ

るGの行列要素（したがって，真空 - 真空の遷移要素）を計算するのは簡単だ．というのは，ガウス積分が2個よぶんにつくだけだからである．最終結果は，

$$\sqrt{\frac{1}{2\pi\sinh T}}\ \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^T\int_0^T dt\,ds\,\gamma^*(t)\gamma(s)\exp(-|t-s|)\right]$$

である．この式に関しては，いくつも注意しなければならないことがある．まず，$\exp(-|t-s|)$ が現われるのは，大きな T に対してだけだということと，「経路積分の重要な部分は，$|t-s|\ll T$ でないかぎり，$X(s)$ と $X(t)$ の間の相関が無視できるような X から現われる」という仮定を使ったからだということである．（実際の形は，

$$e^{-|t-s|}\frac{1}{1-e^{-T}}\left[1+e^{2|t-s|-T}\right]\qquad)$$

のはず）．2番目に，$\gamma(t)$ ではなく，$\gamma^*(t)$ が出てきている．というのは，実数のイオンの座標のフーリエ変換として定義された q_k 座標は，本質的に複素数であり［(21-1)式の H は，したがって，エルミート］，このことを考慮すると，結果的に複素共役 $\gamma^*(t)$ が現われる．((21-9)式は，実の γ と実の q に対してなりたつ)．最後に，因子$(2\pi\sinh T)^{-1/2}$ は，落としておかなければならない．ファインマン - カッツ公式では，それぞれの次元 k に対して，1/2（または，別の単位では，$\hbar\omega/2$）が与えられる．この因子を落してしまうということは，場の無限個あるゼロ点エネルギーをなくするということを意味する．したがって，

$$G=\int dr(\cdot)\exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^T\dot{r}^2\,dt+2\sqrt{2}\,\pi\alpha\right.$$
$$\left.\times\sum_k\frac{1}{2k^2}\int_0^T\int_0^T dt\,ds\exp(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)))e^{-|t-s|}\right\}\qquad(21\text{-}10)$$

が結論として得られる．量 G は，ある点 r' から r'' へいく r のプロパゲータである．その際，フォノン場は，それにともなって，真空状態で始まり真空状態で終わる．(21-10)式の k の積分は実行できて（$1/x$ のフーリエ変換だから)，

$$G=\int dr(\cdot)\exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^T\dot{r}^2\,dt+\frac{\alpha}{\sqrt{8}}\int_0^T\int_0^T ds\,dt\frac{e^{-|t-s|}}{|r(t)-r(s)|}\right\}\qquad(21\text{-}11)$$

が得られる．

(21-10)式か(21-11)式を見ればわかるとおり，(フォノンの) 場をなくしてしまったということは，実質的に，時間的に非局所的な自己相互作用を電子に課したことになる．同じように，電子対について，フォノン場を消去してやると，空間と時間の両方について非局所的な相互作用が残ってしまう．これは，離れた2点にはたらく電気力学の作用と同じである．後者の場合には，先行および遅延の両方を含む差分微分方程式が，その運動方程式である．(21-11)式の積分に特異点をもつ分数があるために，対応する差分微分法方程式の解釈は少しむずかしくなっている．また，適切な境界条件がなにかという問題もある．差分微分方程式は，一般に，ある点において関数値や有限個の微分を与えるのではなく，1つまたはそれ以上の区間で，境界条件を与える必要があるからである．

特異性をもち，かつ，明らかに積分できそうにもない(21-11)式の分母は，大きな問題ではない．ウイーナー積分に実質的に入ってくる経路は，大きな (無限大の) 速度をもち，$1/|r(t)-r(s)| \sim 1/(v_{\text{effective}})|t-s|$ と置き直せるからだ．実際，直接この問題に立ち向かう必要はまったくない．われわれは，汎関数積分を実行するために(21-11)式を使うことはなくて，むしろ(21-10)式に戻って，任意のkを残して積分し，あとでkについて積分する．

実際には，(21-11)式［または，(21-10)式］の積分は，むずかしすぎるので，変分法を使って基底状態のエネルギーE_0の上限を求める．この変分原理は，ジェンセン(Jensen)の不等式に基づくものである．

正の数φ_i, $i=1, \ldots, N$を使って，関数f_iの平均を

$$\langle f \rangle_\varphi \equiv \frac{\sum_{i=1}^{N} \varphi_i f_i}{\sum_{i=1}^{N} \varphi_i} \tag{21-12}$$

で定義する．どんな関数$f(i)$に対しても

$$\langle e^{-f} \rangle_\varphi \geqslant e^{-\langle f \rangle_\varphi} \tag{21-13}$$

が成立する．証明は，簡単である．$K(x)$をxの凸関数とする，つまり，

$$\frac{1}{2}[K(x)+K(y)] \geqslant K\left(\frac{x+y}{2}\right) \tag{21-14}$$

を満たすとする脚注(1)．このとき，

脚注)　用語の使い方によっては，凹ともよばれる．

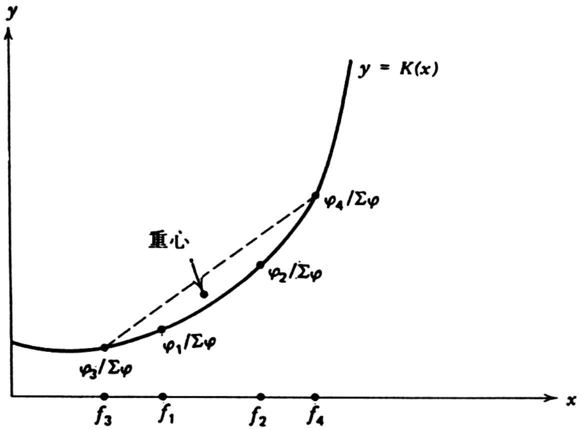


図21-1 $K(x)$のグラフ

$$\langle K(f)\rangle_{\varphi} \geqslant K(\langle f\rangle_{\varphi}) \tag{21-15}$$

がなりたつ．図を使ってこれを証明できる．$K(x)$のグラフは下に凸に曲っている(図21-1)．平均

$$\langle K(f)\rangle_{\varphi} = \sum_i \left[\frac{\varphi_i}{\sum_j \varphi_j}\right] K(f_i)$$

を考えよう．これは，質量$\varphi_i/\sum_j \varphi_j$をもつ点が，位置$(f_i, K(f_i))$に分布している系の重心の$y$座標になっている．図を見よ．同様に，量$\sum_i f_i(\varphi_i/\sum_j \varphi_j)$は，重心の$x$位置．重心は，明らかに曲線の上側にある．よって，証明できた．

指数関数が凸であることを示しておく．これは，

$$o \leqslant (e^{a/2}-e^{b/2})^2 = e^a + e^b - 2e^{(a+b)/2} \tag{21-16}$$

からすぐわかる．

不等(21-13)式を，エネルギーを決める変分原理に使いたい．改めて，記号

$$\langle F(r)\rangle_P = \frac{\int dr(\tau) e^{-P(r(\tau))} F(r(\tau))}{\int dr(\tau) e^{-P}} \tag{21-17}$$

を定義する．ここで，Pは作用積分．いま，$\int dr(\tau)\exp(-S')$が厳密に計算できるよ

うなS'をさがしたい．こうすれば，作用積分$S-S'$が，簡単な摂動としてとり扱えるからだ．そこで，(21-13)式を利用して，

$$G=\int dr(\tau)e^{-S}=\int dr(\tau)e^{-S'-(S-S')}$$

$$=\left(\int dr\,e^{-S'}\right)\langle e^{-(S-S')}\rangle_{S'}\geqslant\left(\int dr\,e^{-S'}\right)e^{-\langle(S-S')\rangle_{S'}} \tag{21-18}$$

とできる．漸近的に（つまり$T\to\infty$で），Gは

$$G\sim e^{-E_0T} \qquad E_0=\text{電子基底状態のエネルギー} \tag{21-19}$$

になる．同様に，

$$\int dr\,e^{-S'}\sim e^{-E_0'T} \quad E_0'=\text{作用積分}S'\text{をもつ基底状態のエネルギー} \tag{21-20}$$

となる．$\langle S-S'\rangle_{S'}$が，時間に比例して（漸近的に）大きくなるとしてみよう．すなわち，

$$\langle S-S'\rangle_{S'}\sim-\delta T \tag{21-21}$$

とする．すると，

$$\frac{e^{-E_0T}}{e^{-E_0'T}}\sim\langle e^{-(S-S')}\rangle_{S'}\geqslant e^{-\langle S-S'\rangle_{S'}}\sim e^{\delta T} \tag{21-22}$$

がなりたつから，対数をとって

$$E_0\leqslant E_0'-\delta \tag{21-23}$$

となる．これが，追い求めてきた変分原理である．

S'をうまく選ぶ指導原理は，それがなるべくSに近くて，かつ，解けるということである．たとえば，

$$S'=\tfrac{1}{2}\int_0^T\dot{r}^2\,dt+\tfrac{1}{2}C\int_0^T\int_0^T dt\,ds\,|r(t)-r(s)|^2e^{-w|t-s|} \tag{21-24}$$

がある．この作用積分に対して，E_0'とδを計算しなければならない．はじめに，

$$\begin{aligned}\delta\sim\frac{1}{T}\langle S'-S\rangle_{S'}&=\frac{\alpha}{\sqrt{8}}\int_0^T\int_0^T ds\,dt\left\langle\frac{1}{|r(t)-r(s)|}\right\rangle_{S'}e^{-|t-s|}\\&\quad+\tfrac{1}{2}C\int_0^T\int_0^T dt\,ds\langle|r(t)-r(s)|^2\rangle_{S'}e^{-w|t-s|}\\&\equiv A+B\end{aligned} \tag{21-25}$$

(AとBは，この式が定義になっている)．(21-25)式の期待値は，2つとも，フーリエ変換を使って計算できる．ただし，ここで，関係

$$\langle \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s))]\rangle_{S'}=\frac{\int dr(\cdot)e^{-S'}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s))}}{\int dr\,e^{-S'}} \tag{21-26}$$

を利用する．もっと一般的な量

$$J(f(\cdot))=\int dr(\cdot)\exp(-S')\exp\left(\int_0^T f(t)r(t)\,dt\right) \tag{21-27}$$

も計算できる．ここで，$f(\tau)$を

$$ik[\delta(\tau-t)-\delta(\tau-s)] \tag{21-28}$$

と置く．これだと，まだ調和振動子であるが，ここには力の項が入っている．Jはしたがって，exp（－古典的作用積分）と平方根の項の積になる．しかし，この平方根はfには依存しないので，(21-26)式で打ち消しあう．よって，これは無視できる．$x(t)$で書かれている古典経路は，作用積分$S'-\int fr\,dt$を変分すれば得られる，すなわち，

$$\frac{d^2x}{dt^2}=-f(t)+2C\int_0^T ds\,e^{-w|t-s|}[x(t)-x(s)] \tag{21-29}$$

である．作用積分が，$\mathbf{r}$のデカルト座標の単純和なので，ここで，1次元xに限定して見ることができる．われわれは，ファインマン - カッツ公式を使いたいのだから，xまたは$\mathbf{r}$の端点をつごうのよいようにとっておいてよい．そこで，$x(0)=x(T)=0$ととる．すると，xに対して，(21-29)式の解は

$$\text{古典的作用積分}=S'(x)-\int fx\,dt=-\tfrac{1}{2}\int_0^T f(t)x(t)\,dt \tag{21-30}$$

の形をとる（これは，どんな2次形式$\Sigma x_iA_{ij}x_j+\Sigma f_ix_i$の変分についても成立する)．そこで，(21-29)式にとりかかろう．仕掛けは，

$$z(t)=\tfrac{1}{2}w\int_0^T\exp(-w|t-s|)x(s)\,ds \tag{21-31}$$

を定義することである．すると，

$$\frac{d^2z}{dt^2}=w^2(z-x) \tag{21-32a}$$

および

$$\frac{d^2x}{dt^2}=\frac{4C}{w}(x-z)-f \tag{21-32b}$$

がなりたつ．(21-32b)式のほうは，端点からの寄与を無視してはじめてなりたつことに注意せよ．(21-28)式で与えられる関数fを使えば，(21-32)式は，普通のやり方で解ける（ここでも，どんなものも，端点からの寄与は，すべてゼロとしている）．その結果を(21-30)式に代入すると，

$$\begin{aligned}\langle\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s))]\rangle_{S'}&=\frac{J(ik\delta(t-\tau)-ik\delta(\tau-s))}{J(0)}\\&=\exp\left[\frac{-2Ck^2}{v^3w}(1-e^{-v|t-s|})-\frac{w^2}{2v^2}k^2|t-s|\right]\end{aligned} \tag{21-33}$$

となる．ただし，

$$v^2=w^2+\frac{4C}{w}$$

である．

(21-25)式の“B”の項は，大きなTに対して

$$\begin{aligned}&\left\langle\int_0^T\int_0^T ds\,dt(x(t)-x(s))^2e^{-w|t-s|}\right\rangle_{S'}\\&=-\int_0^T\int_0^T ds\,dt\,e^{-w|t-s|}\frac{d^2}{dk^2}\langle e^{ik(x(t)-x(s))}\rangle_{S'}\Big|_{k=0}\\&=\frac{2T}{vw}\qquad\text{（3次元では3倍する）}\end{aligned} \tag{21-34}$$

から，計算できる．“A”項のほうは，$1/|r(t)-r(s)|$が$1/k^2$のフーリエ変換になっているという事実から計算できる．その積分は，あらわにはできないので，下に示す最終的な形のなかでお見せすることにする．近似的な作用積分S'に対する基底状態のエネルギーは，そのCに対する変化率を考えると計算できる，すなわち，

$$\begin{aligned}\frac{dE'_0}{dC}&=\frac{d}{dC}\left(-\frac{1}{T}\log\int dx\,e^{-S'}\right)\\&=-\frac{1}{T}\left\langle-\frac{1}{2}\int_0^T\int_0^T dt\,ds|r(t)-r(s)|^2e^{-w|t-s|}\right\rangle_{S'}\end{aligned}$$

である．しかし，これはまさに，(21-34)式で計算された量になっているから，結局，

$$\frac{dE_0'}{dC}=3w^{-1}\left(w^2+\frac{4C}{w}\right)^{-1/2}$$

となるわけだが，これを積分して戻すと，

$$E_0'=\tfrac{3}{2}(v-w)$$

が得られる．ここで，$C=0$では，粒子は自由運動をしているから，$E_0'=0$であるということを使った．

これらを全部集めて（まだ書き下していない"A"項も含めて），

$$E_0\leqslant\frac{3}{4v}(v-w)^2-\frac{\alpha v}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\frac{du\,e^{-u}}{\left[w^2u+\left(\left(v^2-w^2\right)/v\right)\left(1-e^{-uv}\right)\right]^{1/2}} \quad (21\text{-}35)$$

を得る．

このなかで，vとwは，独立変数として扱われているから，E_0のもっともよい上限を与えるvとwをさがすことができる．

すぐ得られるのは，S'を，自由粒子のそれにとることで，そのとき$v=w$となるから，

$$E_0\leqslant-\alpha$$

と計算される．これは，実際には，2次の摂動論の結果と同じものである（摂動論では，上限ではなく，等号の形で評価される）．しかし，vとwについて変分してやると，はるかによい結果が得られる．特に，

$$E_0\leqslant-\alpha-\frac{\alpha^2}{81}\qquad \text{小さな}\,\alpha$$

$$E_0\leqslant-\frac{\alpha^2}{2\pi}-\frac{3}{2}(2\log 2+\gamma)-\frac{3}{4}+\mathrm{O}\left(\frac{1}{\alpha^2}\right)$$

大きいα，γオイラーの定数～0.577

$E_0\leqslant$(21-35)式の数値積分から得られるいろいろな数値

(21-36)

となることがわかっている．

これが，最終解である．読者は，ずっと見てきて，この結果が物理世界の知見の向上にどのように役立ったのかと思われるはずである．私が思うには，(21-36)式

のいちばん重要な点は，比較的簡単な数式でもって，カップリング定数のすべての強度の範囲にわたって基底状態のエネルギーが得られたことである．こうしてポーラロンの，より多くの性質が引きだせる（ノートを見よ）．しかし，結局のところ，ポーラロン自体というよりは，むしろ，よりむずかしい問題，特に，強いカップリングを含む問題が解けるのだという希望をもたせてくれることのほうが重要なのである．

ノート

基礎的論文は，

R. P. Feynman, Slow Electrons in a Polar Crystal, *Phys, Rev*. **97**, 660 (1955)

ポーラロンの背景については

H. Fröhlich, *Adv. Phys*. **3**, 325 (1954)

を見よ．もう少しあとから

T. D. Schultz, *Phys. Rev*. **116**, 526 (1959)

R. P. Feynman, R. W. Hellwarth, C. K. Iddings, and P. M. Platzman, *Phys. Rev*. **127**, 1004 (1962)

が出た．

R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965

R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, New York, 1972

には，広範な議論がしてある．

出版されたFeynmanの種々の記述には，むずかしい点がある．記号がどこで変わったのかかならずしもはっきりしなかったり，誤植が入っていたりする．白状すると，彼が導いた式のなかで，私には再現できないものがある．また，(21-32)式の端点に関して，どうしなければならないのか確信がもてないでいる．

ジェンセンの不等式については，

R. E. Edwards, *Functional Analysis*, Holt-Rinehart & Winston, New York, 1965, p. 291

M. Loeve, *Probability Theory*, Van Nostrand, New York, 1960, p. 159

を見れば詳しく載っている．密度行列を積として書き，ジェンセンの不等式を各項に適用すると，よい上限が得られる．この手法は

E. P. Gross, Path Integrals and Lower Bounds for Density Matrices, *J. Stat.*

Phys. **21**, 215 (1979)

に載っている．最近，ポーラロンのプロパゲータを，上限値と下限値で精度よく押える計算が，Donsker と Varadhan によってなされた．これは，1980年の夏現在で，まだ論文になっていないが，この方法について書かれた初期の論文が

M. Donsker and S. R. S. Varadhan, in *Functional Integration and its Applications*, A. M. Arthurs, ed., Oxford University Press, London, 1975

にある．

22章　スピンとそれに関連する問題

経路積分には，量子力学に新しい見方を与えてくれるという喜びがある（二重スリットの問題などのように）．量子力学には素朴な直感に反する部分がある，ということを重荷に感じる人でも，Feynmanのやさしい説明を聞けば，経路積分がその重みを軽減してくれる，と感じるに違いない．確率のかわりに確率振幅を足しあわせる ── 古典物理学から離れるといっても，それほどひどいものではない．しかし，この哲学的な重さが軽減されたということを受けいれる前に，本当に量子力学の困難な部分がすべて説明されてしまったのか，確かめておくべきである．伝統的なシュレーディンガーやハイゼンベルクの理論に含まれる量子力学の細かなことまでも，経路積分の理論構造に対応させなければならないというのは，大変なことである．Feynmanは，この困難に非常に敏感な人だった．伝統的な方法で定式化されている問題で，彼が再検討しなければならないと感じた問題は，経路積分としてスピンをどのように表現するかということであった．多くの粒子は，内部自由度としてのスピンをもっている．この変数が離散的な値をとるために，連続の経路を足しあわせてプロパゲータを求めるというやり方は，困難であると考えられてきた．

この章では，この問題を2通りの方法で議論する．1つは，非常に直接的な行き方をとる．もう1つは，はるかホモトピー理論にまでおよぶ．しかし，これは，本来の経路積分の精神に近いものであって，しかも，別の問題にも応用がきく利点がある．

22.1　直接法──積積分または時間順序積

直接的なやり方では，哲学的なものも詩的なアイデアもいっさい無視する．ただひたすら，経路積分とはなにか，と思いめぐらすのである．答えは，グリーン関数の行列要素である．行列要素を決めるというは，(1)状態を特定することと，(2)ハミルトニアンを決めること，を意味する．スピンjをもつ非相対論的な1個の粒子の状態ベクトルは

$$|\mathbf{x}, m\rangle \tag{22-1}$$

で指定できる．ここで，m は s_z の固有値，量子数 j は省略，$\mathbf{x}$ は位置．このような粒子のハミルトニアンは一般に，

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V+2\gamma\mathbf{s}\cdot\mathbf{B} \tag{22-2}$$

の形をしている．$\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャル，$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}$，$\mathbf{s}=$ スピン，γ はある定数．$j>1/2$ ならば，さらに $\mathbf{s}$ にくっついて H に寄与するテンソル演算子がある．グリーン関数は，

$$G(x'', m'', t''; x', m', t')=\langle x''m''t''|x'm't'\rangle \tag{22-3}$$

とするのがいちばん直接的である．この G に1章の手続きを施すと，非可換な成分 $\exp(i\varepsilon p^2/2m\hbar)$ と $\exp(i\varepsilon 2\gamma\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)/\hbar)$ が出て，簡単には1個の指数関数にまとめられない．しかし，$\psi(t)$ を t での状態ベクトルだとすると，

$$\psi(t)=\lim_{\varepsilon=t/N\to 0}\exp(-iH(t_N)\varepsilon)\cdots\exp\left(-iH(t_j)\varepsilon\right)\cdots\exp(-iH(t_1)\varepsilon)\psi(0)$$

$$t_j=\varepsilon\left(j-\tfrac{1}{2}\right) \tag{22-4}$$

と書くことには問題ない．極限操作の積の部分は，扱いにくそうに見えるが，数学や物理で普通に見かけるものにすぎない．数学では積積分，物理では時間順序積とよばれている．スピンのエネルギーだけを含むように H を切り捨ててしまうと，それを有限次元の行列と考えることができて，大がかりな計算が可能になる定理が使えるようになる．ここではわかりやすさを考えて，物理流の記号にこだわることにし，時間順序積を導入しよう．つまり，

$$U(b, a)\equiv T\exp\int_a^b(-iH(t))\,dt$$

$$\equiv\lim_{\varepsilon\to 0}\exp\left[-iH(t_N)\varepsilon\right]\cdots\exp\left[-iH(t_j)\varepsilon\right]\cdots\exp\left[-iH(t_1)\varepsilon\right]$$

$$\varepsilon=(b-a)/N \qquad t_j=\left(j-\tfrac{1}{2}\right)\varepsilon+a \tag{22-5}$$

これの主要な性質を列挙すると，

$$U(b, a)=1-i\int_a^b H(x)U(x, a)\,dx \tag{22-6}$$

$$i\frac{\partial U(t, a)}{\partial t}=H(t)U(t, a) \tag{22-7}$$

$$U(t,a)=1-i\int_a^t H(t_1)\,dt_1-\int_a^t H(t_1)\int_a^{t_1} H(t_2)\,dt_2\,dt_1 \tag{22-8}$$
$$+\cdots$$

$$T\exp\int_a^b(-i)[H_1(t)+H_2(t)]\,dt=\left\{T\exp\int_a^b(-i)H_1(t)\,dt\right\}$$
$$\times\left\{T\exp\int_a^b(-i)\left[T\exp\int_a^t(-i)H_1(x)\,dx\right]^{-1}\right.$$
$$\left.\times H_2(t)\left[T\exp\int_a^t(-i)H_1(x)\,dx\right]dt\right\} \tag{22-9}$$

である．もちろん，これらの式が成立する領域は，H，H_1，H_2の性質に依存する．上の公式は，量子力学ではよく知られたものばかりで，たとえば(22-9)式は，相互作用表示のプロパゲータである．

物理の記号から数学の記号に移るには，単に$T\exp\int_a^b$を$\check{\int}_a^b\exp$に置きかえればよい．

スピンがなく，(22-4)式で座標表示の行列要素をとっているならば，普通の経路積分ということになる．スピンがあるとなにが起きるか見るために，スピンの大きさを1/2だけに単純化しよう．さらに，空間座標とスピン座標は，ダイナミカルに分離されていると仮定する．つまり，空間で起きるダイナミックスは，スピン自由度で起きていることには影響をおよぼさないと考えるのである（ただし，その逆は真ではない）．こうすると，Hは

$$H=\gamma\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}(t) \tag{22-10}$$

ととることができる．$\mathbf{B}$の時間依存性は，場自体の変化と，空間的に変化する場のなかで粒子が位置を変えることからくる．このような動力学的な単純化はWKB近似では非常に自然なことである．この単純化が正しいものとして，以下では，(22-10)式のハミルトニアンのスピン - プロパゲータだけを考える．

無限個の行列の積は，扱いやすいとは普通は思えそうもないけれども，ときどき簡単な結果が出てくることがある．1例は磁気共鳴である．この場合の系の磁気モーメントは，時間変化する磁場から系がとり去るエネルギーが最大となる周波数をとったときに，その値を測定すればわかる．磁場は空間的に一様であると理想化すると，

$$\mathbf{B}(t)=\hat{\mathbf{z}}+\lambda(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega t+\hat{\mathbf{y}}\sin\omega t) \tag{22-11}$$

の形に書かれる．ここで，

$$H_1 = -\tfrac{1}{2} i\omega\sigma_z$$
$$H_2 = -i\sigma_z\left(\gamma - \tfrac{1}{2}\omega\right) - i\gamma\lambda\left(\sigma_x \cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t\right) \qquad (22\text{-}12)$$

として公式(22-9)を使うと，

$$U(t,0) = T\exp\int_0^t -iH(t)\,dt = \exp\left(\frac{i}{2}\omega\sigma_x t\right)\exp\left\{-i\left[\sigma_z\left(\gamma - \tfrac{1}{2}\omega\right) + \sigma_x\gamma\lambda\right]t\right\} \qquad (22\text{-}13)$$

となることが簡単にチェックできる．

実験的に見て，この式の特徴は，もし$\omega=2\gamma$ならば，Uの右辺は周期的にx軸のまわりのπの回転になることである．したがって，もともと$+z$方向に向いていたスピンは，この周期で反転する．これが磁気共鳴で実際観測されることである．

連続空間経路積分がうまくいかないときには，時間順序積をディラック方程式に応用することが考えられる．Feynmanの初期の論文にはこのことに考えがおよんでいたように見えるが，一定の外部磁場に置かれたディラック粒子に対して，実際にこれを行なったのは，C. DeWitt-Moretteである．また，このようにして，スピンだけにとどまらず，どんな離散変数上のダイナミックスに対しても経路積分が定式化できるのは明らかである．実際，金属のなかの磁気的イオン不純物による局在化したモーメントの研究例がある．

22.2　スピンの連続モデル

スピンを量子力学の経路積分にとりこむ試みを，もっと意欲的にやってみよう．適当な空間の上に，ある連続な古典力学が定義できて，その経路積分量子化がスピン理論を与えるような，そういう空間を捜してみよう．これには3段階あって，(1)空間を見つける，(2)その上のダイナミックスを定義する，(3)経路の積分，以上である．

その空間を捜すための鍵は，最終的にどんな座標であろうと，それに共役な運動量が，回転に対してきちんと定義できる性質をもつということである．この運動量が，結局は量子化されてスピン角運動量になるべきものなのである．しかし，古典力学では，運動量は座標と速度で定義されたラグランジアンから得られる．したがって，もとになる座標は，回転群$SO(3)$に対して明確な変換性をもつと期待される．

われわれが捜している座標空間をMとよぼう．この座標は，その共役運動量がス

ピン観測量となる内部座標の役割を果たす．ここまでの議論で，$SO(3)$ が M をそれ自身に写すことがわかる．このとき，2つの可能性がある．1つは，M のどの1点から出発しても，$SO(3)$ によってどんな点へも到達できる，すなわち，$SO(3)$ は M の上で推移的な場合である．もう1つは，$SO(3)$ が M の上で推移的ではなくて，M が軌道（軌道とは変換群による点の像のこと）の離散的または連続的な族に分かれる場合である．後者の場合，M はスピンの自由度に加えて，別の内部座標（軌道を指定する）をもつことになる．したがって，スピンを考えるためだけなら，$SO(3)$ が M で推移的であるとしておいてよい．別の要請が出てくれば，その内部自由度はあとから追加することができる．

空間のなめらかさが仮定されるとして，$SO(3)$ が推移的であるような空間は3つしかない．これらは，$SO(3)$ の部分群を法とする商空間である．具体的には，

(1) $SO(3)$，群それ自体．

(2) $SO(3)/SO(2)$，本質的には，2次元球面 S^2．

(3) $SO(3)/SO(3)$，ただの1点．

商群をつくる際に法となる部分群は，系の固定部分群 (isotropy group) である．すなわち，内部座標が記述しようとしている力学的対象を，不変にするような回転の群である．たとえば，上の2番目の場合は双極子を記述する．3番目のケースは，スピンがない対象．$M=SO(3)$ 自身をもつ対象はコマである．$SO(3)$ もコマの位置もオイラーの角をパラメータとすることができる．

(3) のケースは，スピン運動量を与えることができないから，明らかに除外される．あとの議論から，双極子も，整数と半整数の両方のスピンのモデルとしてなぜ不適切であるか明らかになる．この不適切さをあとで示すために，M を $SO(3)$ の群多様体にとり，われわれのダイナミックスの対象をコマとよぶことにする．

つぎのプログラムは，M 上のダイナミックスを定義すること，すなわちラグランジアンを具体化することである．われわれの場合，M はコンパクトなリー群（またはその剰余類空間の1つ）と同定されるから，自動的に力学が生ずる．つまり，系の経路はこの空間の測地線になる．このリー群には自然な計量がともなっている．いおうとしているのは，もし M が群なら，計量はラグランジアンに一致するということである．しかし，これですべての可能性がつくされているわけではない．$SO(3)$ の測地線運動は，球コマに対応する．対称および非対称のコマは，もっと一般的で $SO(3)$ の計量とは異なったラグランジアンをもっている．われわれの目的はいちばん単純なスピンのモデルを得ることであるから，ここでもやはり球コマより

複雑なものを考える理由はなさそうだ（もっとも，異なったスピンをもつ関連した粒子の質量スペクトルを合わせるために，そうしたい人もいるかもしれないが）．いずれにせよ，いまの目的では，スピンしている物は球コマである（ここで，「である」といった意味は，スピンと球コマが「数学的には区別がつかない」ということであって，スピンしている粒子がコマのような空間的広がりをもっていることを意味しているわけではない）．もし$SO(3)/SO(2)$を調べる場合には，類似の自然な計量は，球面上の大円（測地線）であることに注意しておく．

スピンモデルと経路積分の間に課される要請を考えれば，スピンする物体をコマと最終的によぶことに，驚くことはないはずである．1950年に，BoppとHaagとRosenは，スピンのモデルとして確立することを念頭に置いて，量子力学的コマの研究を行った．彼らは，波動関数（そして微分演算子）が内部座標の空間で定義できる（これらの波動関数は回転行列の成分になっている）ということ，および，そこから整数と半整数のスピンが両方とも現われるという事実を発見した．このコマを電磁場に置くと，通常のパウリのスピノール理論に一致する．

最後に，この古典力学系に対する経路積分に注目する．運動軌跡は6次元空間$\mathbf{R}^3 \times SO(3)$のなかにできる．ただし，ここには空間自由度も含めてある．プロパゲータは，変数として，積空間のなかで最初と最後の時間および位置をもっている．

われわれがここで計算したい経路積分は，前には現われたことのない2つの困難に直面する．1つは，$SO(3)$が単連結ではないということ．つまり，連続的に変形しても互いに一致することのない経路が存在する．2番目に，空間に固有の曲率があるということ．実質的に，「質量」が座標の関数になっている．質量はラグランジアンのいちばん特異的な部分（速度の2乗の項）に掛かっているから，この種の計算には十分注意をはらわねばならない．これらの理由によって，いったんあとの章で2つの問題を処理してから，スピンのための経路積分を続けることにする．

ノート

スピンを経路積分にくりこむために，多くの試みがなされている．Feynmanは，この方面に関しては，多くを書き残していない．ただ，Hibbsと書いた教科書の問題2-6のなかで，1次元空間のディラック方程式に対する相対論的経路積分を説明している．スピンの自由度をも含むフェルミオンのための場の理論を最初に定式化した理論のなかには，“反交換のC-数”を含むものがある．たとえば，

P. T. Matthews and A. Salam, Propagators of a Quantized Field, *Nuovo Cim.*

2, 120 (1955)

を見よ．Klauder は別のアプローチをとった．彼は，フェルミオンとボソンの間の区別を，被積分関数の特異性のために現われる汎関数積分のあいまいさを解消するなかで解決しようとした．その論文は，

J. R. Klauder, The Action Option and a Feynman Quantization of Spinor Fields in Terms of Ordinary C-Numbers, *Ann. Phys*. **11**, 123 (1960)

場の対が使われている最近の仕事は，

J. Tarski, Feynman-Type Integrals for Spin and the Functional Approach to Quantum Field Theory, *Acta Phys. Austriaca* **44**, 89 (1976)

22，23，24 章で述べる方法は，私のもので，場の理論も相対論も含んでいないという点では，上に紹介した理論ほど意欲的なものではないかもしれない．この研究の出典は

L. S. Schulman, A Path Integral for Spin thesis, Princeton University, Princeton, N. J., 1967

L. S. Schulman, A Path Integral for Spin, *Phys. rev*. **176**, 1558 (1968)

J. F. Hamilton, Jr., and L. S. Schulman, Path Integrals and Product Integrals, *J. Math. Phys*. **12**, 160 (1971)

である．経路積分以外の方法で，スピンモデルとしてコマを使ったものとしては，

N. Rosen, Particle Spin and Potation, *Phys. Rev*. **82**, 621 (1951)

F. Bopp and R. Haag, Über die Mlglichkeit von Spinmodellen, *Z. Naturforsch*. **5a**, 644 (1950)

がある．22.1 節の終わりで述べた C. DeWitt-Morette の仕事は，

C. Morette (De Witt), On the Definition and Approximation of Feynman's Path Integrals, *Phys. Rev*. **81**, 848 (1951)

である．ディラック方程式について最近の研究については，

G. J. Papadopoulos and J. T. Devreese, Path Integral Solutions of the Dirac equation, *Phys. Rev. D* **13**, 2227 (1976)

T. Miura, Relativistic Path Integrals, *Prog. Theor. Phys*. **61**, 1521 (1979)

を参照．局在化した磁気モーメントに経路積分を応用するのは，活発かつ有用な研究分野になっている．不完全だけれども，参考文献をあげておく：

B. Mühlschlegel, Functional Integrals and Local Many-Body Problems:Localized Moments and Small Particles, in *Functional Integration and Its Applications*,

A. M. Arthurs, Ed., Clarendon, Oxford, 1975

J. R. Schrieffer, lecture notes, Canadian Association of Physicists, Summer School, Banff, 1969 (unpublished)

R. F. Hassing and D. M. Esterling, Functional-Integral Approaches to the Anderson Model : A Comparison of Results in Limiting Cases, *Phys. Rev. B* **7**, 432 (1973)

D. J. Amit and C. M. Bender, Path-Integral Approach to the Magnetic Impurity Problem, *Phys. Rev. B* **4**, 3115 (1971)

R. Kishore, Functional Integral Approach to the Static Susceptibility of the Anderson Model, *Nuovo cim.* **55B**, 143 (1980)

Mühlschlegelの論文とHasssingとEsterlingの論文には，初期の文献がたくさん載っている．

23章　多重連結空間での経路積分

本章は，4つの部分からなる．最初に，多重連結空間での経路積分の特徴的な例を1つ調べる．つぎに，一般論を扱いやすくしておくために，数学（代数的位相幾何学）をかなり入念に説明する．その数学形式にのっとって，経路積分の定義を行なう．最後は，別の数学の一分野，関数解析を使って，前章までに扱ったことを深く解析する．

23.1　円上に拘束された粒子

円に閉じこめられて1次元運動をしている系を考える．軸が固定されている回転体や，輪管のなかの玉，あるいは，実際の世界に近い例をあげるとすれば，周期境界条件をもつ無限周期格子のなかを運動する電子などを考えておけばよい，いずれの場合でも，座標はφで，$0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$の範囲にある．ただし，$\varphi=0$と$\varphi=2\pi$を同一視する．ラグランジアンとして，

$$L=\tfrac{1}{2}I\dot{\varphi}^2 \tag{23-1}$$

をとる．この空間を$SO(2)$の群多様体とみなせば，これも自然な計量になっている．この系の連続経路は，連続関数$\varphi(t)$であり，これも0と2πが同一視される必要がある．これら経路の集合は，「回転数」を使って，部分集合に分解できる．回転数は，ある点をとって，経路がそこを反時計まわりに通過した回数から時計まわりに通過した回数を引いたものである．同じ端点と同じ回転数をもつ2本の経路は，互いに変形させて一致させることができる．つまり，端点を固定したまま一方の経路を連続的に形を変えて，もう一方に重ねることができる．互いに異なる回転数をもつ2本の経路に対しては，このような変形は不可能である．

これから，経路積分を計算するための新しい自由度を考えることができる．この系のプロパゲータを（この章では$\hbar=1$とする）

$$K(\varphi'', t''; \varphi', t') = \sum_{\substack{\varphi(t')=\varphi' \\ \varphi(t'')=\varphi''}} e^{iS[\varphi(t)]}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\varphi(t)\in g_n} e^{iS[\varphi(t)]} \tag{23-2}$$

と書く．ただし，

$$g_n = \{\varphi(t) | t' \leqslant t \leqslant t'', \varphi(t') = \varphi', \varphi(t'') = \varphi'',$$
$$\varphi(t) \text{は連続で，回転数} n \text{をもつ}\}$$

である．連続経路だけに限定するのは，ウイーナー積分に対して，そして経路積分の経路に対しても期待されるように，ほとんどすべての経路は連続，かつ，いたるところ微分不可能である，ということに根拠を置いている．さて，経路積分が対応するシュレーディンガー方程式を満たすということは，局所的な方法で証明される．たとえば，4章では，波動関数を無限小時間だけ時間発展させることによって証明した．したがって，(23-2)式のnについての和のなかで，各項が個別にシュレーディンガー方程式を満たすものと仮定してもよいだろう（23.3節で，これを証明する）．これから

$$\sum_n A_n \sum_{\varphi\in g_n} e^{iS(\varphi)} \tag{23-3}$$

は，A_nのすべてが1とはかぎらないが，(23-2)式（そこではすべてのA_nが1である）とまったく同じように完全なプロパゲーターになる資格があることがわかる．しかし，このいい方は若干弱めなければならない．つまり，「(23-3)式に採用しうる自明ではない$\{A_n\}$が存在する」と．だが，これらは任意というわけではなく，

$$A_n = e^{in\delta} \qquad \delta \text{は実数} \tag{23-4}$$

の形をとらなければならない．その理由を見るために，Kを計算すると想像してみよう．それは，

$$K(\varphi'', t''; \varphi', t') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n K_n(\varphi'', t''; \varphi', t') \tag{23-5}$$

の形をしている．ここで，K_nは，集合g_nに属するすべての経路の和．（t''等は固定

したまま）φ'' を変化させて，K_n と K の変わり方を見てみる．もちろん，A_n は φ には依存しない．もし，φ'' が1周分だけ先に進んだとしても，K_n は K_{n-1} になるが，K のほうには物理的になんの変化もないはずなので，たかだか位相因子がつくぐらいのことである．この因子を $e^{i\delta}$ と書くと，K_n の間の線形独立性を仮定して，ただちに

$$A_{n+1}=e^{i\delta}A_n \tag{23-6}$$

を得る．ユニタリー性から A_0 の絶対値を1と固定し，（本来任意の）位相をゼロととると，(23-4) 式となる．

さらに抽象的な性質，つまり，被覆空間と自己随伴性へと進む前に，(23-1)式の経路積分を実行しておこう．実際得られる結果は，それ自体興味深い．

実軸 R から円への写像

$$p:\mathrm{R}\to S^1 \qquad p(x)=x-\left[\frac{x}{2\pi}\right]2\pi \tag{23-7}$$

を考える．ここで，大かっこは，「その整数部分」を表わす．したがって，$0\leqslant p(x)<2\pi$．局所的には，p は逆写像をもつから，ある φ の原像の1つがどこかに指定されれば，その近傍も R に一意的に写像される．ただ，ゼロの近傍は 2π の倍数のそれに写像される，ということに注意しておけばよい．図23-1 に写像 p を示す．こうして，連続な経路 $\varphi(t)$ が $\varphi(0)=\varphi'$ と $\varphi(1)=\varphi''$ を条件に与えられたとき，$p^{-1}(\varphi')$ が明確に選択されると，$\varphi(t)$ も R 上で再現される．すなわち，$p^{-1}(\varphi(t))$ が

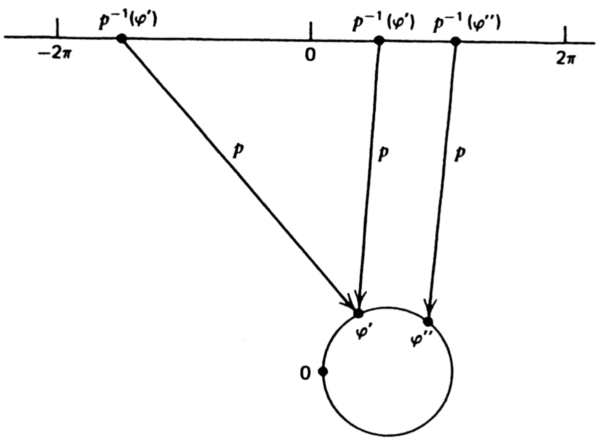


図23-1 写像 $p:R\to S'$ は，直線上の点をある φ' やある φ'' に写す．φ' の2つの逆像が示されている．

はっきり決まる．そうすると，同じ端点をもち，同じ$p^{-1}(\varphi')$を選んだ経路$\varphi(t)$でも，φ''の異なった原像をもちうるということは明らかで，回転数というのは，本質的に，S^1に戻るために$p^{-1}(\varphi'')$から差し引かなければならない数$[p^{-1}(\varphi'')/2\pi]$のことだとわかる（ここで「本質的に」と断わったのは，回転数を確定するための基準点をまだ決めていないからだ）．回転数nをもつ経路からなる和K_nを計算するには，前もって選んでおいた実軸R上の$p^{-1}(\varphi')$から出発して（φ'の原像選び方によって決まってくるφ''の原像を$p^{-1}(\varphi'')$として），$p^{-1}(\varphi'')+2\pi n$で終わる経路に対して経路積分を行なえばよい．写像pはなめらかだから，古典力学のラグランジアン(ついでにいえば，シュレーディンガー方程式も）をS^1からRへ移すのには，なにも問題がない．

R上では，(23-1)式のラグランジアンは自由粒子のそれになるから，ただちに

$$K_n(\varphi'',t'';\varphi',t')=\left(\frac{I}{2\pi iT}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{iI}{2T}(\varphi-2n\pi)^2\right) \tag{23-8}$$

を得る．ただし

$$\varphi=\varphi''-\varphi',\quad T=t''-t' \tag{23-9}$$

であり，回転数を計算するための起点をゼロにとる．(23-8)式を(23-5)式と(23-6)式に代入すると，

$$K(\varphi'',t'';\varphi',t')=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\frac{I}{2\pi iT}\right)^{1/2}\exp\left[in\delta+\frac{iI(\varphi-2n\pi)^2}{2T}\right] \tag{23-10}$$

となる．Kは，したがって，古典的な関数の1つ，ヤコビのテータ関数そのものである．その定義を思いだしておくと，

$$\theta_3(z,t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\exp(i\pi tn^2+i2nz) \tag{23-11}$$

である．上半面$\mathrm{Im}(t)>0$では，θ_3はzについて解析的である．これは，準周期的であって

$$\begin{aligned}\theta_3(z+\pi,t)&=\theta_3(z,t)\\ \theta_3(z+\pi t,t)&=e^{-i\pi t-2iz}\theta_3(z,t)\end{aligned} \tag{23-12}$$

を満たす．θ_3の大きな特徴は，ポアソンの和公式により，

$$\theta_3(z,t)=(-it)^{-1/2}e^{z^2/i\pi t}\theta_3\left(\frac{z}{t},-\frac{1}{t}\right) \tag{23-13}$$

となることである．(23-10)式と(23-11)式を比較し，$\theta_3(z,t)=\theta_3(-z,t)$ を使うと，

$$K(\varphi'',t'';\varphi',t')=\left(\frac{I}{2\pi iT}\right)^{1/2}e^{iI\varphi^2/2T}\theta_3\left(\frac{\pi\varphi I}{T}-\frac{\delta}{2},\frac{2\pi I}{T}\right) \tag{23-14}$$

と書き直すことができる．I/T は実数だから，この関数は解析的ではなく，I/T に適当な正の虚部をもたせて定義される解析関数の境界値になっているにすぎない．

δ の意味を解釈し，ついでに結果自身のチェックも行なうため，プロパゲータ(23-14)式を通常の量子力学的結果と比較してみる．円上でのシュレーディンガー方程式は，

$$-\frac{1}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=i\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{23-15}$$

である．その定常解は，

$$\psi_m(\varphi,t)=u_m(\varphi)e^{-iE_mt}\qquad u_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(im\varphi+\frac{i\delta\varphi}{2\pi}\right)$$

$$E_m=\frac{1}{2I}\left(m+\frac{\delta}{2\pi}\right)^2\qquad m=0,\pm1,\ldots \tag{23-16}$$

の形で得られる．ただし，条件 $u(2\pi)=u(0)$ にはこだわらない．δ は，それぞれのベクトルが 2π だけ回転したときに示す位相変化そのものであって，あとで δ の可能な物理的解釈を議論する．定常状態の和で表わしたグリーン関数は，

$$G(\varphi'',t'';\varphi',t')=\sum_m\psi_m(\varphi'')\psi_m^*(\varphi')\exp(-iE_m(t''-t')) \tag{23-17}$$

である．これもヤコビのテータ関数であり，実際

$$G(\varphi'',t'';\varphi',t'),=\frac{1}{2\pi}\exp\left[\frac{i\delta\varphi}{2\pi}-\frac{i\delta^2T}{8I\pi^2}\right]\theta_3\left(\frac{\varphi}{2}-\frac{T\delta}{4\pi I},\frac{-T}{2\pi I}\right) \tag{23-18}$$

と書き直すことができる．(23-18)式と(23-14)式は，見かけ上異なったプロパゲータになっている．前者は定常状態の和，後者は古典経路の和から導かれたものである．両者が厳密に一致することは，テータ関数の恒等式(23-13)式によって保証されている．

このグリーン関数がどの程度普通と変わっているかを知っておくのは，扱った問

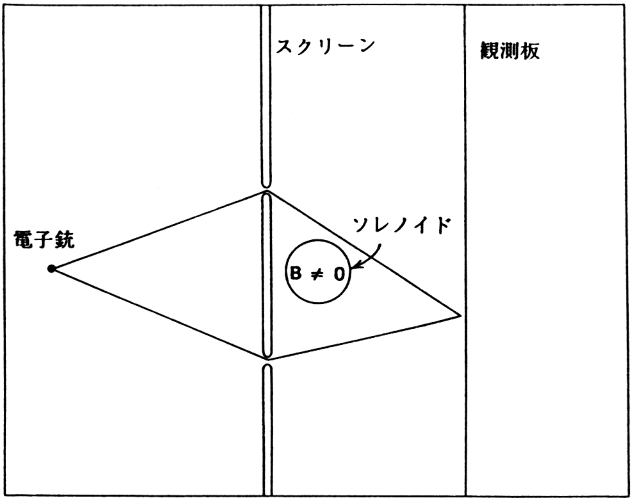


図23-2　アハラノフ - ボーム効果．電子銃から放出された電子はスリットを通過する．2枚の壁にはさまれた$B \neq 0$のソレノイドが，スクリーンの影の部分に置かれている．壁とソレノイドは透過できない．これらの状況がWKB概念に適合するように設定されているものとする．

題の性質が初等だけに，おもしろい．このグリーン関数自体は普通の量子力学からも導かれているものだから，これが変わっているといっても，本来経路積分がおかしいということではない．$\mathrm{Im}\, t > 0$では，テータ関数のゼロ点は，2重周期的になっていて，z- 面上で無限格子をなしている．$\mathrm{Im}\, t \to 0$に従って，この格子はつぶれてきて，zの実軸方向に移動してくる．正かつ有理数のtに対しては，どの区間にも有限個のゼロ点が存在する．無理数のtでは，クロネッカーの定理により，ゼロ点は実のz軸上に稠密に存在する（もし，qが無理数ならば，点の集合$nq-[nq]$, $n=0, 1, \ldots$は，区間$(0, 1)$では稠密に存在する）．だからといって，Gが恒等的にゼロであることにはならない．というのは，われわれはいま，ひどく解析性に欠けた状態を議論しているからだ．実際，積分核としてGはノルムを保存し，積分してもゼロにはならないことがわかっている．

δの物理的な解釈については何通りか可能である．1次元の周期性結晶の性質を調べるために，格子のなかの1個のセルに注目したとしてみよう．明らかに，完全に周期的な境界条件（すなわち位相変化をなにも考えない）は不適切である．実際，ブロッホ波の場合，位相は，$\mathbf{k}$を波数ベクトル，$\boldsymbol{\rho}$を格子ベクトルとして，$2\pi\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}$だけ進む．この位相が$\delta$である．位相変化が適切な形で物理的な文脈に入っ

てくる2番目の例は，アハラノフ - ボーム(Aharonov-Bohm)効果である．この効果を見るための“実験的”なレイアウトを図23-2に示した．この図で，電子は平面上を動くことができるが，透過できないように理想化されたソレノイドがあるおかげで，経路積分に入ってくる軌道の回転数を考えることの重要性がわかるようになっている．こうして，異なったスリットを通過する軌道に対応する波動関数には，任意の相対的な位相が入ってくる．この位相が，回折による最大値の位置をずらす物理的効果をもつ．一方，もしソレノイドへの透過不可能性が完全には実現できないとすると，ソレノイド内の磁場やどこにでも広がっているベクトルポテンシャルによって，回折のパターンがずれる．この場合には，位相の変化は，ソレノイドを通過する磁束流によるものであることがわかる．

ノート

円上の経路積分は，

W. K. Burton and A. H. DeBorde, *Nuovo Cim*. **2**, 197 (1955)

が考えた．しかし，ホモトピー理論によって新たな自由度を開拓したのは（私の知るかぎり）

L. S. Schulman, *Phys. Rev*. **176**, 1558 (1968)

が最初である．クロネッカーの定理については，

G. H. Hardy and E. M. Wright, *An Introduction to the Theory of Numbers*, Clarendon Press, Oxford, 1962, p. 376

を見よ．23.1節の終わりにでてきた応用（アハラノフ - ボーム効果と周期格子の話し）は，

L. S. Schulman, *Phys. Rev*. **188**, 1139 (1969)

L. S. Schulman. *J. Math. Phys*. **12**, 304 (1971)

に与えられている．

23.2　ホモトピー理論の初歩

円上の経路積分を行なうために展開した概念は，ほかの多重連結空間にも容易に一般化できる．この一般化をもっともエレガントに記述するには，ある程度，代数的位相幾何学，特にホモトピー理論の知識が必要である．これからその説明をしていくが，細かいことに全面的に立ちいらなくても，その概念のあるものは伝えられ

るという期待のもとに，ほとんどが発見法的な証明だけ（またはまったく証明なし）に終始する．

空間XからYへ写像する連続関数

$$f, g: X \to Y \tag{23-19}$$

を考える．XとYは位相空間で，物理に必要なよい性質を全部もっているとする．病的な性質は，自然科学の興味の対象外として考えない．特に，これらは，弧状連結と仮定する，つまり，X（あるいはY）のなかのどの2点も連続曲線で結ぶことができる．

定義：　もし，（連続）関数$h: X \times I \to Y$（ここで$I=[0, 1]$，つまり単位区間）があってXのすべてのxに対して，

$$\begin{aligned} h(x,0)&=f(x) \\ h(x,1)&=g(x) \end{aligned} \tag{23-20}$$

ならば，fはgにホモトープといい，$f \sim g$と書く．つまり，fは連続的にgに変形される．

定理：　ホモトピー（$\sim$）は，同値関係である．

証明：　上の定義を使う練習として，同値関係の性質の1つを証明する．3つの関数f, g, kがあって，

$$f \sim g \quad と \quad g \sim k \quad ならば，f \sim k である．$$

定義によって，連続関数h_1とh_2があって，

$$h_1(x, 0)=f(x),\ h_1(x, 1)=g(x),\ h_2(x, 0)=g(x),\ h_2(x,1)=k(x)$$

を満たしている．すると，fからkへの変形を引き起こす関数は

$$h(x, t)=\begin{cases} h_1(x, 2t) & 0 \leqslant t \leqslant \frac{1}{2} \\ h_2(x, 2t-1) & \frac{1}{2} \leqslant t \leqslant 1 \end{cases}$$

ととれる．

この定理が重要なことは，ほかの同値関係と同じように，ホモトピーが空間を同値類に分割するのに利用できるということだ．これらの「ホモトピー類」は，互い

にホモトープな関数の集合である．関数fの同値類を$[f]$と書く．

われわれは，互いに変形可能で，かつ，始点と終点が同じの経路の類に関心がある．こういうものに対しては，相対ホモトピーの概念が適切である．

定義： $f, g: X \to Y$，および，$X_0 \subset X$とせよ．もし，fをgに変形する関数hがあって，

$$h(x_0, t) = f(x_0) = g(x_0) \quad \text{すべての } t \in I \text{ と } x_0 \in X_0 \text{ に対して}$$

となるとき，fはgとX_0に関してホモトープといって，$f \sim g$ rel X_0と書く．

明らかに，相対ホモトピーも同値関係であり，その同値類をホモトピーの場合と同じ記号で書くことにする．

ある1点y_0とすべてのxに対して，定数写像$c: X \to Y$, $c(x) = y_0$を常に定義することができる．cにホモトープな関数を，定数にホモトープという．（Yが弧状連続であることを使って，すべての定数写像$X \to Y$（いろいろなy_0に対して）は互いにホモトープであることを証明せよ）．iを恒等写像$i: X \to X$, $i(x) = x$とせよ．

定義：もし恒等写像$i: X \to X$が定数にホモトープのとき，Xは可縮であるという．

定理：Yが可縮な空間であれば，すべての写像$f: X \to Y$は定数にホモトープである．

証明：どの$f: X \to Y$も$f \circ i: X \to Y$と書かれる．そこで，iを定数に変形すればよい．$[(f \circ g)(x)$は$f(g(x))$を意味するものとする$]$．

この定理から，可縮な空間はホモトピー構造をもたないことがわかる．n次元のユークリッド空間E^nは可縮であって，そこでは一般的にホモトピーの描像なしで経路積分ができる．一方，S^2や$SO(3)$（の群多様体）は可縮ではない．この$SO(3)$の性質が，われわれがホモトピー理論にながながと浸っている理由である．

ここで，代数的位相幾何学の一般的な哲学にコメントしておこう．位相幾何学（トポロジー）は，もし2つの空間が連続写像で1対1に対応するならば，それらを同一視する．この条件は，要求としてきつい場合があるかもしれない．代数的位相幾何学は，空間に付随している代数構造を使って空間を分類しようというものである（ホモトピーの同値類が群の構造をもちうることを，すぐあとに示す）．この分類は有効かつ美しいが，一方，トポロジーによる分類にくらべてはるかにあらっぽい．それは，ホモトピー理論がすべてのnに対して，E^nを（その他の多くの空間同様）

ひとかたまりにしか扱わないという点にも現われた．実際，空間を分類する際のホモトピー理論の役割は，以下の定義によるホモトピー群の研究に依らなくても定式化できる．

定義：　空間XとYは，もし，$f:X\to Y$および$g:Y\to X$となる関数fとgがあって，

$g\circ f:X\to X$がX上で1にホモトープであり，

$f\circ g:Y\to Y$がY上で1にホモトープであるとき，

同じホモトピー型であるという．

明らかに，これは，同値関係を定義する．

ホモトピー理論は，経路に適用することで物理的応用ができる．まず，いくつか定義を述べる．

定義：　位相空間Xのなかの経路とは（連続）写像$\alpha:I\to X$である．ここで，$\alpha(0)$は始点，$\alpha(1)$は終点．もし，$\alpha(0)=\alpha(1)$ならば，αは，閉じているといわれる．逆の経路α^{-1}は，関数$\alpha(1-u)$, $u\in I$である．もし，ある点$x_0\in X$およびすべての$u\in I$に対して，$\alpha(u)=x_0$ならば，αは，ヌル経路という．$\alpha(1)=\beta(0)$を満たす2つの経路α, $\beta:I\to X$に対して，経路の積$\alpha\beta$とは，つぎの経路γ，すなわち

$$\gamma(u)=\begin{cases}\alpha(2u) & 0\leqslant u\leqslant\frac{1}{2}\\ \beta(2u-1) & \frac{1}{2}\leqslant u\leqslant 1\end{cases}$$

である．

混乱を避けるために注意すると，経路の積とは2つの関数の合成のことではなく，$\alpha\beta$は，最初にαの上を移動し，つぎにβを移動することを意味する．経路に対するホモトピーの概念は，より一般的な関数の場合の特例にすぎない．

定義：　2つの経路αとβは，$\alpha\sim\beta \quad \mathrm{rel}\{0, 1\}$ならばホモトープという．

前後の文脈から明らかなときは，記号“rel{0, 1}”は省略する．ホモトピーの例を図23-3に示す．積に関するいくつかの性質は，あとで群構造を確立する際，重要になる．

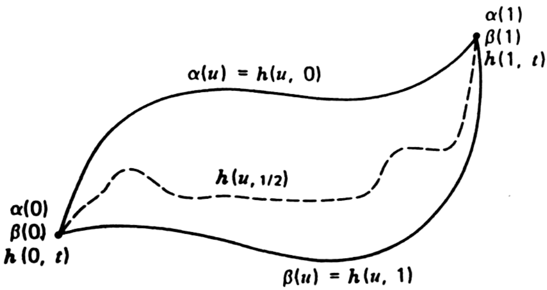


図23.3　経路αとβ（これらは実線で描いてある）は互にホモトープであり，ホモトピー写像$h:I\times I\rightarrow Y$によって一方から他方へと変形される．hの中間の値は，破線で描かれている．

定理：　(1)　もし，$\alpha\sim\gamma$, $\beta\sim\delta$で，$\alpha\beta$が存在するとすれば，$\gamma\delta$が存在して，$\alpha\beta\sim\gamma\delta$.

(2)　もし$\alpha\sim\beta$ならば，$\alpha^{-1}\sim\beta^{-1}$.

(3)　もしβがヌル経路で$\alpha\beta$が存在したとすると，$\alpha\beta\sim\alpha$．もし，γがヌル経路で$\gamma\alpha$が存在したとすると，$\gamma\alpha\sim\alpha$.

(4)　もし，3つの経路α, β, γに対して，$\alpha\beta$と$\beta\gamma$が存在したとすると，$(\alpha\beta)\gamma$と$\alpha(\beta\gamma)$が存在し，それらは$(\alpha\beta)\gamma\sim\alpha(\beta\gamma)$.

(5)　すべてのαに対して，$\alpha\alpha^{-1}$と$\alpha^{-1}\alpha$が存在し，それらはヌル経路にホモトープである．

(6)　もし$\alpha\beta^{-1}$が存在して，閉じているならば，$\alpha\beta^{-1}$は，$\alpha\sim\beta$のときにかぎり，ヌル経路にホモトープである．

証明：　1例として，(3)を証明する．$\alpha\beta$が存在するということは，単純に$\alpha(1)=\beta(0)$を意味している．したがって，すべてのuに対して$\beta(u)=\alpha(1)$．そこで，$h(u, 0)=\alpha\beta$, $h(u, 1)=\alpha$, $h(0, t)=\alpha(0)$, $h(1, t)=\alpha(1)$となる関数$h(u, t)$（2つの変数について連続な）をつくらなければならない．このような関数の1つは

$$h(u,t)=\begin{cases}\alpha\left(\dfrac{2u}{1+t}\right) & 0<u<\frac{1}{2}(1+t)\\ \alpha(1) & \frac{1}{2}(1+t)<u<1\end{cases}$$

である．この他の項目についても，同様にして，定義の簡単な応用にすぎない．

個々の経路は，それぞれの同値類に属しており，それらの同値類の積は，明らかに

$$[\alpha][\beta]=[\alpha\beta]$$

で定義できる．類$[\alpha]$と$[\beta]$からどのようなメンバーαやβを代表として選ぼうとも，$[\alpha\beta]$はその選び方には依存しない．結合則は，第(4)項から出てくる．積に関する単位元は，ヌル経路の類が対応し，類の逆元は，逆経路の類である．

さて，ホモトピー理論の中心概念を紹介する準備が整った．すなわち基本群である．始まり（および終わり）の点が皆同じである複数の閉じた経路を考える．共通に含まれるこの点を基点という．（相対的ホモトープな）これらの経路の同値類は，群をなし，上に述べた意味の積をもつ．空間Xで基点x_0をもつこの群を基本群$\pi_1(X, x_0)$と書く．

定理：　$x, y\in X$があって，Xが弧状連結だとすると，$\pi_1(X, x)$は$\pi_1(X, y)$と同型写像(isomorphism)になっている．

証明：　γを$\gamma(0)=x$, $\gamma(1)=y$となる経路とせよ．そのときもし，$[\alpha]\in\pi_1(X, y)$ならば，経路$\gamma\alpha\gamma^{-1}$は点xに始まり，その点で終る．同型性を与える写像は，明らかに$[\alpha]\to[\gamma][\alpha][\gamma^{-1}]$である．

弧状連結の空間に対しては，基点を記号から省いて$\pi_1(X)$と書くことがしばしばある．2つの空間が関係をもっていれば，その基本群もそうである．つぎに定理は簡単に証明できる．

定理：　連続写像$f:X_1\to X_2$があるとする．このとき，準同型写像(homomorphism) $f^*:\pi_1(X_1, x)\to\pi_1(X_2, f(x))$が存在する．もし$f$が同相写像(homeomorphism)なら，$f^*$は同型写像である．

実際は，同型性はこの定理から推定されるより簡単に得られる．X_1とX_2が互いにホモトープならばよい．

定理：　X_1とX_2が弧状連結で，同じホモトピー型だとする．このとき，$\pi_1(X_1)$は

$\pi_2(X_2)$ にホモトープである．

証明：　空間のホモトピー同値の定義のところに現われた写像を使って，同型写像をつくりだせばよい．

定義：　$\pi(X)=\{e\}$ をもつ弧状連結空間 X は，単連結とよばれる．

ここで，いくつか例をあげておこう．球面 $S^2=\{(x, y, z)\in\mathbf{R}^3|x^2+y^2+z^2=1\}$ は，単連結である．S^2 は，可縮ではないが，その基本群は自明である．S^2 上のどのような曲線も1点に縮めることができる．S^2 を点と区別する高次のホモトピー群が存在するが，ここではふれない．これらは本質的に，$I\times I$ あるいはより高次元の立体から，問題にしている空間への写像を含む．したがって，π_1 に指数1をもつ．

円 S^1 は互いに変形可能でない経路をもつ．実際，異なった回転数をもった経路は互いに変形させて一致させることはできない．また，2つの経路の積は，2つの回転数の代数和を回転数としてもつ．こうして，$\pi_1(S^1)$ は整数の加法群 $\mathbf{Z}$ とされる．

2次元トーラスは $S^1\times S^1$ であり，その基本群も，したがって，$\mathbf{Z}\times\mathbf{Z}$ である．

数字の8の字（すなわち $\mathrm{EIGHT}=\{(x, y)\in\mathbf{R}^2|x^2+(y-1)^2=1 \text{ or } x^2+(y+1)^2=1\}$）は，それを構成する2つの円のそれぞれを1回転することによって生みだされるホモトピー群の部分群をもつ．しかし，これらの生成元は互いに交換しないので，$\pi_1(\mathrm{EIGHT})$ はこれらの生成元の一連の積からなる非可換群である．

回転群 $SO(3)$ の群多様体は，単連結ではない．この空間として，半径 π の堅いボールを考えればよい．ただし，（球面の）対蹠点は，互いに同一視される．ある軸 $\hat{n}$ のまわりの反時計方向への角度 φ だけの回転は，方向 $\hat{n}$ に向かって，ボールの中心から半径方向に距離 φ の位置にある点に対応させる．このボールの外側の面を一度通過したこの空間の経路（すなわち，回転の連続な族）は，1回も通過しない経路に変形することはできない．しかし，偶数回通過した経路は，そのように変形可能である．これから，基本群は，2つの要素をもつ群であることがわかる：1つは，（いつものように）ヌル経路の同値類に対応する単位元であり，もう1つは，1つの軸を角度 $(2j+1)2\pi$（j は整数）だけの回転に対応する（もちろんその他の経路も含む）．より詳しくは，その描像も含めて，Hamermesh の教科書を見ていただきたい．

経路積分理論にとって極めて有用な数学的構造は，普遍被覆空間(universal covering space)である．自明でない基本群をもつ空間 X を考えよう．普遍被覆空間

は，局所的にはちょうどXのように見えるが，にもかかわらず単連結になっている．ある意味では，普遍被覆空間は，結果として単連結になるようにXのコピーを何枚も貼りあわせたものである．これを考えることの利益は，普遍被覆空間の上で経路積分ができて，その結果を使ってXの上のプロパゲータをつくりだせるということである．

被覆空間（特に普遍被覆空間）の定義には，被覆射影(covering projection)の概念が含まれている．以下のような定義では，ポイントをややぼかすところもあるが，被覆射影とは基本的には，被覆空間の小さな近傍と，底空間の近傍の間の同相写像である．2つの空間が同じように見えるという考え方がここに反映されている．

われわれは，常に，空間Xが，弧状連結であり，もちろん局所的にも弧状連結であり，局所的に単連結であると仮定する．あとの2つの性質は，Xの十分小さな近傍では，局所的に弧状連結であり，局所的に単連結である，という意味である．

定義：　写像$p: B\to X$がXの上への写像で，すべての$x\in X$に対してxを含む開集合Uがあって，$p^{-1}(U)\subset B$が開集合で，かつ，$p^{-1}(U)$に限定された（すなわち，$p|_{p^{-1}(U)}: p^{-1}(U)\to U$の）$p$が同相写像のとき，$p$を被覆射影という．$B$は，$X$の被覆空間という．

定理：　空間Xに経路αとα'があって，$\alpha(0)=\alpha'(0)=x_0$, $\alpha(1)=\alpha'(1)=x_1$, $\alpha\sim\alpha'$ $\mathrm{rel}\{x_0, x_1\}$とする．点x_0の原像$p^{-1}(x_0)$が1つ与えられたとすると，$p^{-1}(\alpha)$と$p^{-1}(\alpha')$はBのなかで一意的に定義される経路である．そして，$p^{-1}(\alpha)\sim p^{-1}(\alpha')$ $\mathrm{rel}\{p^{-1}(x_0), p^{-1}(x_1)\}$がなりたつ（原像$p^{-1}(x_1)$は$p^{-1}(\alpha)$によって一意的に決まる）．

証明：　経路（αとしよう）の一意的な原像を得るには，$p^{-1}(x_0)$から出発して，$p^{-1}(x_0)$のまわりをとり囲むように進み，pがそこで同相写像になっている十分小さな近傍の点に沿って行けばよい．$p^{-1}(\alpha)$が$p^{-1}(\alpha')$とホモトープであることを示すには，p^{-1}を使って，αをα'に変形する写像$h=I\times I\to X$をBにもちあげればよい．

この定理の重要な点は，Xのホモトピー類を，積を保ったまま，Bのホモトピー類に一意的に写すことを可能にすることである．この定理は，「もちあげ定理」の簡単ではあるが重要な1例になっている．これはどのような環境のもとに，写像$f: Y\to X$が，$p\circ f^*=f$（図式が可換）となるように，写像$f^*: Y\to B$（ここで$p: B\to X$）

にもちあげることができるか，というものである．いまの場合は，$Y=I$.

Bのどの閉じた経路もX上の閉じた経路に射影できるというのは事実だが，Xの閉じた経路のほうは，当然，経路の最初と最後において，$p^{-1}(x_0)$が異なった値をとるようにもちあげられてもよい（x_0は基点）．こうして，pは写像$\bar{p}:\pi(B)\to\pi(X)$を引き起こすが，これは実際，$\pi(B)$とその像（一般にそれは$\pi(X)$より小さい）の間の同型写像である．同型写像の性質は，Bのなかでホモトープな経路は，pを使ってホモトピー写像をXに送りこむことにすれば，Xのなかでもホモトープである，ということからくる．一方，Bでホモトープではない経路は，Xでもそうではない．もしそうでなければ，定理によって，ホモトピー写像はBにもちあげることができたからだ．したがって，$\pi(B)$は$\pi(X)$より小さいか，たかだか同じにしかなれない．

一般に，Xは，たくさんの被覆空間をもちうる．たとえばどの$\pi(X)$の部分群も$\pi(B)$になっている．被覆空間の特別な場合として普遍被覆空間があって，これでは$\pi(B)=\{e\}$である．この空間を構成する正準的な方法があって，これは，Xを被覆するどんな空間をも，その上から被覆するように被覆射影がつくりだせる，という意味で普遍的なものである．この詳細には立ちいらないが，そのかわり，その概念の感じをつかんでもらうために，つぎの例題を述べておこう．

円の普遍被覆空間は直線である．$S^1=\{z\in\mathrm{C}\,|\,|z|^2=1\}$とする．被覆射影として$p:\mathrm{R}\to S^1$, $p(t)=\exp(it)$, $t\in\mathrm{R}$をとる．$z\in S^1$に対して，zの円全体より小さい近傍は，pがその上で（定義によって要請されるように）同相写像になるような近傍を与える．このとき，$p^{-1}(z)=\{\arg z+2n\pi,\ n=0,\ \pm 1,\ \ldots\}$で，$\pi_1(S^1)$の各要素の原像が存在するように，$0\leqslant\arg z<2\pi$とする．Rはもちろん，単連結である．また，R上で閉じた経路にもちあげられるS^1上の経路だけが，S^1でヌル経路にホモトープになる．円をそれ自体の被覆空間ととることもできる．この場合，p^{-1}が（無限個の葉数をもつ対数関数のようではなく）2葉のリーマン面をもつ平方根の関数となるように，$p(z)=z^2$とすればよい．基本群の写像は，整数を偶整数の部分群に写像するのと同じものと考えればよい．

トーラスの普遍被覆空間は平面である．

$SO(3)$の普遍被覆空間は，$SU(2)$の群多様体である．このときの写像pは，物理でならだれでも習っている．たとえば，$x\in\mathrm{R}^3$として，xを一意的にエルミート行列

$$\underset{\sim}{x}=x_1\sigma_1+x_2\sigma_2+x_3\sigma_3 \tag{23-21}$$

に対応させよう．ここで，σ^1, σ^2, σ^3はパウリのスピン行列．すると，$U\in SU(2)$に対して，xの回転の規則は

$$\underset{\sim}{x}' = U\underset{\sim}{x}U^{\dagger}$$

で与えられる．もしR_{ij}が3×3行列なら，同じ回転は

$$R_{ij} = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\sigma_i U \sigma_j U^{\dagger}\right) \equiv \left(p(U)\right)_{ij} \tag{23-22}$$

で実行されるが，これがp自身の定義でもある．明らかに，Uと$-U$は同じ回転を与える．$SU(2)$は，単連結である．ただし，$SO(3)$の原像を貼りあわせるやり方はS^1とRの関係の場合ほど簡単ではない．写像$p：SU(2) \to SO(3)$の明確な描像は，つぎのことを認識すれば得られる．$U \in SU(2)$は一組の複素数αとβで指定できる．ただし，$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$，すなわち，S^3上の点．$SO(3)$に行くには，点(α, β)と$(-\alpha, -\beta)$（これは$-U$に対応），つまり，3次元球の対蹠点を同一視すればよい．こうして，$SU(2)$のなかの$SO(3)$の2つのコピーが，S^3の北と南の半球にイメージされる．しかし，赤道に沿っては，対蹠点は$SO(3)$のなかであっても，同一視しておかなければならない．これは，正に射影3次元空間で，もちろん，$SO(3)$の群多様体のモデルとして前に述べた堅いボールと同相である．

ノート

ホモトピー理論の参考文献は豊富である．入門レベルとしては，つぎのものが推奨できる，

P. J. Hilton, *An Introduction to Homotopy Theory*, Cambridge University Press, London, 1964

J. G. Hocking and G. S. Young, *Topology*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1961

E. M. Patterson, *Topology*, Oliver and Boyd, Edinburgh, 1959

もう少し進んだものとしては，

E. H. Spanier, *Algebraic Topology*, McGraw-Hill, New York, 1966

の教科書がある．回転群については，

M. Hamermesh, *Group Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1962

が豊富に説明されている．$SU(2)$を使って回転を記述したものとしては，上のHamermeshの他に

H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading,Mass., 1950

がある．われわれは，ホモトピー理論を，非常に簡単かつ直感的なレベルで扱ってきた．不幸なことに，もっと深く（たとえば，Spanierの本のように）理解したい

と思っている読者は，圏(category)と関手(functor)の理論に直面する．それは，勉強しがいのある対象だが，物理屋には受けいれやすいとはいえない．本書で述べた多くの定理は，より弱い条件でも成立する．しかし，本書では一般化についての数学的議論までは行かなかった．頭にあるのは物理的に興味のある空間だけだから．

23.3　ホモトピー理論の経路積分への応用

X 上のシュレーディンガー方程式は，

$$H\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad H = -\tfrac{1}{2}\Delta + V(x) \tag{23-23}$$

の形で，Δ はラプラシアン（または，Laplace - Beltrami の演算子）で，曲がった空間では，div·grad の一般化（24章で述べる）．プロパゲータは，

$$K(x,t;y,0) = \sum_{\substack{x(\cdot)\\ x(0)=y\\ x(t)=x}} \exp(iS(x(\cdot))) \tag{23-24}$$

と書かれる，つまり，古典作用積分の経路和．リーマン空間では運動エネルギーは単に計量になっている（これについても，あとでそれにふさわしい場所を設けて述べることにする）．

さて，X が単連結ではないとしてみよう．この場合には，23.1節のように，和のなかに入ってくる経路が，互いに変形可能なグループに分けられるか調べてみる価値がある．その集合の違いは，ホモトピーによる同値類によって識別できる．さらに，もう一度提案したいのは，異なるホモトピー類についての和が，1とはかぎらない係数をもって，経路積分に入ってくるということである．これによって，プロパゲータに新しい自由度が1つふえることになる．考えられるプロパゲータの形は，

$$K(x,t;y,0) = \sum_{\alpha} c_\alpha \sum_{\substack{x(\cdot)\in\alpha\\ x(0)=y\\ x(t)=x}} \exp(iS(x(\cdot))) \tag{23-25}$$

である．ただし，α は y から x への経路のホモトピー類を表わす．23.1節で $\{c_\alpha\}$ を導入したときの議論したように，経路積分がシュレーディンガー方程式を満たすというの証明は局所的になされるものである（4章参照）．（前に主張したように），経

路和

$$K_\alpha(x,t;y,0)\equiv\sum_{\substack{x(\cdot)\in\alpha\\ x(0)=y\\ x(t)=x}}\exp(iS(x(\cdot)))\tag{23-26}$$

が個別にシュレーディンガー方程式を満たすからといって，係数$\{c_\alpha\}$がいらないということにはならない．23.2節で得た展望に立てば，K_αに関するわれわれの主張が正しいことは，以下のように確かめられる．

空間Xは普遍被覆空間Bをもち，写像$p:B\to X$が局所的に同相写像となるような被覆射影pが存在する．ひとたびある点の原像が指定されれば，Xの各経路は，Bにもちあげられる．具体的なイメージをもつために，$p(y^*)=y=$（上のプロパゲーターの初期位置）となる点$y^*\in B$をとろう．すると，異なるαに属する経路は，xの異なった原像に対応して，Bのなかでは異なった点に終点をもつ（もしこの2つが同じ点を終点にもつと仮定すると，Bの単連結性によって，それらはBのなかでは互いに変形可能で，ホモトピー写像がXに射影することになる）．こうして得られるxの相異なる原像をx_α^*とする．すべてのαに対して，$p(x_\alpha^*)=x$であり，$x(\cdot)\in\alpha$の1本1本の経路はy^*からx_α^*への経路にもちあげられる．ここで，なめらかさの仮定を入れておこう．われわれに興味のある物理的な空間では，pは十分なめらかで，ラプラシアン（これは純粋に局所的な量）をBにもちあげることができるとしても合理的だと考えられる．ラプラシアンは，もちあげられても，Xの場合と同じ形をしている．こうして，pはシュレーディンガー方程式をBにもちあげるから，(23-26)式の関数K_αは，正にプロパゲータ

$$K^B(x_\alpha^*,t;y^*,0)=\sum_{\substack{\text{paths in } B\\ x^*(0)=y^*\\ x^*(t)=x_\alpha^*}}\exp(iS(x^*(\cdot)))\tag{23-27}$$

である．ここでも，Sおよびラグランジアンはもちあげられたものであり，(23-27)式は，プロパゲータの空間Bにおける経路積分表示になっている．$K^B(x_\alpha^*,t;y^*,0)$をxに射影しおろせば，厳密にK_αになる．K^BはBで局所的にシュレーディンガー方程式を満たすから，K_αもXで満たす．

係数$\{c_\alpha\}$に対する条件はつぎの考察から得られる．$\xi(u)$，$u\in I$をxで始まりそこで終わる閉じた経路だとする．量uは時間変数ではない．uを変化させるにつれ，Kの和に入っているすべての各種プロパゲータも変化し，さらに，Bにおける種々の経路の終点 x_α^* も変化する．その事情は

$$f(u) \equiv K(\xi(u), t; y, 0) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} K_{\alpha}(\xi(u), t; y, 0)$$
$$= \sum_{\alpha} c_{\alpha} K^{B}(\xi_{\alpha}^{*}(u), t; y^{*}, 0) \qquad (23\text{-}28)$$

と表現できる．ここで，2番目の等号は，関数K_αと$K^B(\xi_\alpha^*\ldots)$が数値的には同じものであることを表わす．点$\xi_\alpha^*(u)$は，明確に定義されており，$u=0$に対してはx_α^*である．uが変化してxを変えるにつれて，もちあげx_α^*も変わり，その位置がちょうどξ_α^*となる．ここでいちばん大事な点は，$\xi(1)=x$であっても，$\xi_\alpha^*(1)$は$\xi_\alpha^*(0)$とははっきり違うということであり，一般にそれは，最初のx_α^*とは異なる点にあり，xの別の原像になっている．実際，$\xi_\alpha^*(1)=\xi_\beta^*$ならば，ホモトピー類は

$$\beta = [\xi]\alpha \qquad (23\text{-}29)$$

の関係になる．これはホモトピー類の通常の積であり，$[\xi]$は，さらに基本群$\pi_1(X, x)$の要素になっている．

上で説明した変換は，物理的内容にはなんの効果ももたらさないはず．したがって，$u=1$として得たものと$u=0$としたものでは，位相因子φを除いて同じものでなければならない．この位相因子は$[\xi]\equiv h$だけに依存しうる．よって，

$$f(1) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} K^{B}(x_{\beta}^{*}, t; y^{*}, 0) = \sum_{\beta} c_{\beta h^{-1}} K_{\beta}(x, t; y, 0)$$
$$= \exp(-i\varphi_h) f(0) = \sum_{\beta} \exp(-i\varphi_h) c_{\beta} K_{\beta}(x, t; y, 0) \qquad (23\text{-}30)$$

と書かれる．(23-30)式の3番目と5番目の表現は，各項ごとに一致していなければならない．これを見るために，十分短い時間tの間にyを変化させる．おのおのの和のなかの各項は，このときデルタ関数に向かう．そして，各和からとったこの1組みの項は，t, x, yの関数として等しくなければならない（それらは，Bのなかにおける同じ点の間のプロパゲータであることに注意）．いま，yを$\pi_1(X, y)$のある非単位（非恒等）要素に沿って変化させてみる．すると，おのおのの和のなかの別の組みあわせの項も等しくならなければならない．したがって，すべてのβと，適当なhに対して，

$$c_{\beta h^{-1}} = \exp(-i\varphi_h) c_{\beta} \qquad (23\text{-}31)$$

が導かれる．さらに，2回目の変換を，$\eta(u)\in k\in\pi_1(X, x)$の経路にしたがって行なうと，すべての$\beta$に対して

$$c_{\beta h^{-1}k^{-1}}=\exp\bigl(-i(\varphi_h+\varphi_k)\bigr)c_\beta \tag{23-32}$$

となる．一方，kh 類による変換は

$$c_{\beta(kh)^{-1}}=\exp(-i\varphi_{hk})c_\beta \tag{23-33}$$

を与える．しかし，h と k の変換をつぎつぎと行なったものは，hk の変換と同じもののはずだから，結局

$$\varphi_{hk}=\varphi_h+\varphi_k \tag{23-34}$$

とならねばならない．この式が，われわれの主要な結果である．この位相は，基本群の加法的（したがって可換な）表現をなす．どれか1つの c_α を，1と選ぼう．また，β を $\beta=\alpha(\beta^{-1}\alpha)^{-1}$ と変形する．すると，

$$c_\beta=\exp\bigl(-i\varphi_{\beta^{-1}\alpha}\bigr)=\exp\bigl(i\varphi_{\alpha^{-1}\beta}\bigr) \tag{23-35}$$

となる．プロパゲータの最終形は，したがって，

$$K(x,t;y,0)=\sum_\beta \exp\bigl(i\varphi_{\alpha^{-1}\beta}\bigr)K_\beta(x,t;y,0) \tag{23-36}$$

となる．ただし，α は，y から x への経路の固定されたホモトピー類と了解しておく．また，各項 K_β は，β のホモトピー類に属する経路上でとった $\exp(iS)$ の和．(23.1節の円上の経路積分では，$\varphi_{\alpha^{-1}\beta}$ は $n\delta$ である．ここで回転数 “n” は $\alpha^{-1}\beta$ に対応する．というのは，円上の基本ホモトピー群は，整数 $\mathbf{Z}$ の加法群だから.)

$SO(3)$ の上で経路積分をとるためには，もう少し道具立てがいる．特に，$SO(3)$ の曲率については，別途考える必要がある．しかし，平らな空間に対して Laidlaw と DeWitt が巧妙に(23-34) 式を応用した例があるので，それを紹介する．

N 個の区別できない粒子を扱う通常の方法は，座標空間 R^{3N} を定義し，ハミルトニアンが交換演算子と可換であることから，N 次の対称群(S_N)の表現を調べる，というものである．この方法は，美的に見ても，実用上の観点からも，まずい点がある．まず，区別不可能という概念を，この場合にしか通用しない特別な基準で扱っている．形式論的には，座標 $\mathbf{r}_A$ を電子 A に，$\mathbf{r}_B$ を B に直接割りふってたとしても意味があるように思える．2番目に，素粒子には実現されないとわかっているたくさんの S_N の表現がある．このような擬統計理論を排除して，フェルミオンやボソンだけに，注意を向ける必要がある．

Laidlaw と DeWitt は，R^{3N} 自身を直接見るべきではないといっている．むしろ，1つのベクトルを交換することによって互いから到達しうる N 個の組（下の超ベク

トルy）を，互いに同一視するR^{3N}の商空間を見るほうがよい．彼らの結果を形式的に述べるには，（見かけ上）技術的な点がどうしても入ってくる．R^{3N}上の点を

$$y=(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_N) \qquad \text{各}\ \mathbf{x}_i\ \text{は3次元ベクトル}$$

と書く．R^{3N}から，どのベクトルであれ，2つのベクトル$\mathbf{x}_i$と$\mathbf{x}_j$とが，その上で一致する点yを除外する．N個の区別不可能な粒子の正しい座標は，したがって，

$$X=[R^{3N}-\{\text{一致する点}\}]/S_N$$

である．ここに，“$/S_N$”は，対称群による商空間を意味する．つまり，粒子の入れかえで移るyは，互いに同一視する．ホモトピー理論のいくつかの定理（ここでは詳細にふれないが）によって，Xの基本群がまさにS_Nになっていることが出てくる．しかし，ここで，Xの上でプロパゲータをつくるにあたって，表現の可換性が表に出てくる．特に，S_Nには2つの可換な表現しかない．

$$D^B(g)=+1 \qquad \text{すべての}\ g\in S_N$$

$$D^F(g)=[\ \text{入れ換え}\ g\ \text{の符号}\ ]$$

これらは，それぞれ，フェルミオンとボソンに対応している．可換性を要求することで，擬統計理論を避けることができる．

ノート

この章の主要な結果［(23-34)式］は，

L. S. Schulman, A Path Integral for Spin, *Phys. Rev.* **176**, 1558 (1968)

で暗黙のうちに使われた．しかし，基本ホモトピー群の表現を使った理論は

L. S. Schulman, Approximate Topologies, *J. Math. Phys.* **12**, 304 (1971)

M. G. G. Laidlaw and C. M. DeWitt, Feyman Functional Integrals for Systems of Indistinguishable Particles, *Phys. Rev.* D **3**, 1275 (1971)

ではじめて定式化された．Laidlaw と DeWitt には詳細な証明がある．これには，本文で述べた擬統計論に対する応用も載っている．別の証明は，

J. S. Dowker, Quantum Mechanics and Field Theory on Multiply Connected and on Homogeneous Spaces, *J. Phys, A* **5**, 936 (1972)

に与えられている．アーベル表現に対する要請に関して，n成分のスピノールに対しては，Kは$n\times n$行列であり，(23-30)式は$f(1)=Uf(0)$に拡張されることに注意．

ただし，Uは，$n \times n$のユニタリー行列．私にいえることは，Uはユニタリーではあるが，π_1のアーベル表現にはかならずしもなっていないということだ．スピンをもつ区別不可能な粒子については，まだ擬統計論が残るかもしれない．

本章で説明したようなホモトピー理論を使って量子化するということは，Wu と Yangの非可積分の位相因子，および，Kostant と Souriauの“予備量子化”と関係がある．これについては，

P. A. Horvathy, Quantisation in Multiply Connected Spaces, *Phys. Lett.* **76A**, 11 (1980)

を参照．非可積分の位相因子とゲージ場については，

T. T. Wu and C. N. Yang, *Phys. Rev. D* **12**, 3845 (1975)

に研究がある．これらの研究者たちには，電磁場のようなゲージ場をどうやって特徴づけるかということに関心がある．アハラノフ - ボーム効果（23.1節）の場合から，場の強さ**E**や**B**だけでは不十分である．しかし，アハラノフ－ボーム効果から得られる情報というのは，（すべての可能な曲線のまわりの）$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathrm{x}$が磁場を特徴づけるのに要求されるのではなくて，むしろ，$\exp[i\oint e\mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}/\hbar c]$，つまり位相だけが特徴づける，ということである．彼らは，ゲージ変換を使って，それぞれの問題点を自分たちのもち場で考えたわけだが，われわれは経路積分の理論のなかで議論しよう．アハラノフ - ボームの実験では，ソレノイドをとり除くことによって，R^3からチューブを切りだすことが，位相項$(e^{i\delta})^n$としてプロパゲータに入るあいまいな量δを生みだすことを見た（23.1節）．この量δは$\delta = \oint e\mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}/\hbar c$と同定され，物理的な効果は$e^{i\delta}$にだけ依存する．したがって，$\delta$が$2\pi$の整数倍になっているような場では，場がまったくないのと同じである．

へそ曲がりな人は，ゲージ変換だけからでも，プロパゲータにホモトピー因子を導きだすことができると思うかもしれない．しかしそれは，経路和の描像を受けいれることに消極的であったり，あるいは，経路積分を単にトロッター公式の詩的ないい直しにすぎないと思おうとしているから，素直になれないでいるのかもしれないのだ．いずれにせよ，プロパゲータにホモトピー因子をつくりだすために，ゲージ変換を使うことはできる．それは，多重連結空間では，なめらかで多価の波動関数を定義することができるからである．このようにしてホモトピー因子を導いたものとして，

L. S. Schulman, Caustics and Multivaluedness : Two Results of Adding Path Amplitudes, in A.M.Arthurs, Ed., *Functional Integration and Its Applications*,

(Proc. of London Con-ference, 1974) Oxford University Press, London, 1975 がある．場の量子化でも，ホモトピー位相因子が使われる．

N. K. Pak and H. C. Tze, Chiral Solitons and Current Algebra, *Ann. Phys.* **117**,164 (1979)

を見よ．

23.4　対称演算子の拡張

関数（函数）解析は，すでに理論物理のレパートリーに入っていると思うので，ホモトピーの場合のようには，手広く背景説明をしない．23.3節で扱ったことをもっと広い視野に入れるための，ほんの最小限の説明にとどめる．

簡単のため，円 S^1 上のハミルトニアン

$$H=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$$

に限定する．S^1 上の二乗可積分の関数の理論の観点からは，$L^2(S^1)$ は，$L^2(I)$, $I=[0,1]$ とは区別できない．経路積分のはじめのほうで出てきたあいまいさは，ここでは，H が対称（たとえば0と1でともにゼロになる関数に対しては）であるのに，境界条件が与えられないうちは自己随伴演算子ではない，ということに現われる．特に，H は，自己随伴演算子に拡張する方法がたくさんあって，しかもその1つ1つが異なるスペクトルをもつという意味で，本質的には自己随伴でない．

経路積分はユニタリー演算子 $\exp(-itH)$（これは，ユニタリー性から自己随伴の生成演算子をもつ）をつくりだす方法であるから，必然的に H を拡張してしまう．以前の仕事に戻ると，H の定義域は

$$f(1)=e^{i\varphi}f(0)$$

を満たす関数からなることがわかる．ただし，個々の φ は，H のそれぞれ特定の拡張を定義する．しかし，対称演算子の拡張に関する一般論を使うと，H の不足指数 (deficiency index) は(2, 2)であることがわかる．したがって，可能な拡張のクラスは，上に掲げた1 - パラメータ族よりも，はるかに大きい．

例として，$f(1)=f'(0)$, $f'(1)=-f(0)$ という条件は，H を自己随伴にする定義域を定める．この演算子のスペクトルは簡単に計算できて，たしかに，経路積分流の拡張から得られる集合 $\{(1/2)(\varphi+2n\pi)^2 \mid n=0, \pm1, \pm2, \ldots\}$ とは異なっている．

経路積分流の拡張には，単にヒルベルト空間の構造だけではなく，演算子と空間に関するより多くの情報を必要とする．座標空間の対称性は，プロパゲータが回転に対して不変でなければならないという要請によって保たれる．特に，経路積分による拡張は，Hの平方根，つまり，並進対称性の生成演算子$-id/dx$，がよいふるまいをすることを要求する．

ときには，ホモトピーの考えがないような状況でも，経路積分を使って演算子の拡張をすることができる．Buslaevはなめらかな物体による回折を研究していて，この物体の外側に空間のコピーを2つ用意し，経路を1つのコピーからもう一方へと走らせると有効であることに気がついた．直接および間接的な寄与がとる相対的な符号が，回折を引き起こす物体の表面での境界条件，ディリクレ型かノイマン型，を決める．鏡像の方法についても同じような考え方ができる．

ノート

対称演算子の拡張，不足指数などは

F. Riesz and B. Sz-Nagy, *Functional Analysis*, Ungar, New York, 1955

L. A. Lusternik and V. J. Sobolev, *Elements of Functional Analysis*, Wiley, New York, 1974

および，多くの本に扱われている．Buslaevの研究は，

V. S. Buslaev, Continuum Integrals and the Asymptotic Behavior of the Solutions of Parabolic Equations as $t \to 0$.Applications to Diffraction, in *Topics in Mathematical Physics*, Sh. Birman, Ed., Consultants Bureau, New York, 1967, p. 67

である．

WuとYangの論文に出ているトピックスの1つ（23.3節で引用した）は，関数解析による興味深い結果を示唆している．彼らは，自分たちの方法を応用して，Diracの磁気単極子の磁荷の量子化を推定している．その議論は，以下のようである．磁気単極子は場

$$\mathbf{B} = g\frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

をつくる．ただし，gは磁荷．ベクトルポテンシャルがこの場にともなって（$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$から）

$$\mathbf{A} = \frac{g(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\boldsymbol{\varphi}} \tag{23-37}$$

のように現われる．ここで，$\hat{\varphi}$は，極座標のφ方向の単位ベクトル．この場**A**は，直線$\theta=\pi$上で特異である．これは，しばしば，この文脈で「ストリング」とよばれる．ゲージ変換によって，ストリングは別の場所に送りこまれる．もう1つ別の場の例として

$$\tilde{\mathbf{A}}=\frac{g(-1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\varphi}$$

も考えられるが，これは$\theta=0$にストリングをもつ．この2つを結びつけるゲージ変換は，

$$\chi=2g\varphi \qquad \mathbf{A}-\tilde{\mathbf{A}}=\nabla\chi$$

である．ここで，φは座標関数．場**B**にはストリングの方向を特定するものはなにもないので，ストリングの位置は任意であろうと期待できる．さて，WuとYangは，このゲージ変換を実行するとき，場のなかにいる電子の波動関数には，$\exp(ie\chi/\hbar c)$を掛けておかなければならない（すべてのゲージ変換の場合と同じように，5章参照）と主張する．もし，ゲージ変換の前後で波動関数が一価でなければならないということなら，φが2πの整数倍をとって，位相因子が1にならなければならない．こうして，

$$\frac{2ge}{\hbar c}=\text{整数} \tag{23-38}$$

が要求される．これは，gに対するディラックの量子化条件である（23.3節のノートでやったように，以上の議論を経路積分の言葉に置きかえてみると，おもしろい演習になる）．

関数解析にからんで，私がもっている疑問は，上の問題がヒルベルト空間ではどう見えるか，ということである．つまり，いまハミルトニアン$H=(\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c)^2/2m$が手渡されたとする．ただし，**A**は上の(23-37)式のそれである．その物理（つまり，導かれる**B**が球対称だという事実）は不問にふすことにし，ゲージ変換もやめておく．わかっていることは，ただ，**A**が直線$\theta=\pi$上で特異であることだけとする．波動関数の一価性すら要求しない．というのは，原理的には，これは不連続性を議論することよりはるかにましだし，ヒルベルト空間では二乗可積分性だけが唯一の要請だからだ．この章の議論に基づく推定は，Hあるいはそれに関連した演算子，たとえば$\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c$は，ディラック量子化条件(23-38)式を満足しないかぎり，自己随伴ではない，ということである．

24章　曲がった空間の量子力学

ワクワクすることや，争いごと，論争などが好きな人，特に，今現在，深刻な問題に直面していない人には，曲がった空間の量子化についての歴史がきっと気にいってもらえると思う．経路積分は，この問題についてのいちばん新しいアプローチである．問題は，自明ではない（これはいわずもがな）．これは，量子力学の演算子の順序づけの問題に密接に関連していて，簡単で一意的な解が出てこない．すべての混乱の原因については，私の意見をいわせてもらえば，そこには深刻な物理的問題がないということである．曲がった空間の量子化の詳細な点にまで依存するような実験結果は，まだ示されていない．これが，（私を含めて）人々が間違った符号をつけたり，2倍の因子をつけたり，しばらく忘れ去られていた古い公式が（因子や符号まで含めて）新しい論文で“再発見”され続けている理由である．物理学の本質に関する上のような原理主義的な見解は，実は，私個人の好みとは合わないのだけれども，この問題の歴史を見るにつけ，残念ながらこの感を深くせざるをえない．

座標q^i, $i=1, \dots, n$, リーマン計量g_{ij}をもつ多様体Mを考える．もし，計量が運動エネルギーを定義するとし，ポテンシャル（およびベクトルポテンシャル）を考えるとすると，ラグランジアンは

$$L=\tfrac{1}{2}g_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j+a_i\dot{q}^i-v \tag{24-1}$$

である．以下，通常の和の規約を採用する．a_jはベクトルポテンシャル，vはポテンシャル，ドットは時間微分を表わす．ドットは，経路に沿った他のパラメータについてとったものでもよい．それはたとえば，固有時間とか，FockやFeynmanの「第5パラメータ」で，tは$\{q_i\}$の1つとしてそのなかに含ませておいても構わない．実際，これが普通，相対論での状況である．

Lに伴うハミルトニアンは古典力学の文脈のなかでは，明確に定義できて

$$H=\tfrac{1}{2}g^{ij}(p_i-a_i)(p_j-a_j)+v \tag{24-2}$$

である．g^{ij}は，g_{ij} ($g^{ij}g_{jk}=\delta^i_k$) の逆行列．また，

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}=g_{ij}\dot{q}^j+a_i \tag{24-3}$$

HあるいはLを量子化するにあたって，あいまいさが入りこむ原因については，いくつか考えられる．計量g_{ij}はqの関数である．一般的にいって，pは$\partial/\partial q$の形に移行するわけだから，$g(p-a)(p-a)$がすでに順序づけの問題を宿している．経路積分についていえば，4章のベクトルポテンシャルの量子化を思いだすと，ジレンマがよく理解できる．積

$$a(q)\dot{q}\,dt \tag{24-4}$$

は，つぎのどれをとるかで，結果が変わってくる．すなわち，(経路積分のメッシュ$t_1, \ldots, t_N$は，共通に仮定したとして)，$a(q(t_i))\Delta q$, $a(q(t_{i+1}))\Delta q$, $a(q(t_i/2+t_{i+1}/2))\Delta q$, あるいは，別のやり方．これらの値の差は，$a'(q)(\Delta q)^2$のオーダーであるが，経路積分のなかに入ると，$a'(q)\Delta t$のオーダーになる．この問題，および，その伊藤積分との関連は5章でしっかり議論した．(24-1)式のラグランジアンの場合は，問題がさらに深刻である．というのは，g_{ij}が，$(\Delta q)^2/\Delta t$のオーダーの項に掛かっているいるが，これは1のオーダーの量なので，gを計算する点をどこに選ぶかがプロパゲータの最終形に響いてくる．

ここでは，演算子の順序づけの詳細にはもう立ちいらないが，この点，つまりどこで関数の値を評価するかを決める段階で，経路積分量子化にもあいまいさが入ってくるのだということを認識しておくのは，重要なことである．ただでごちそうにありつくことはできないのだ．

ハミルトニアンの形として，われわれが「好きな」のは，簡単なものということだけである．たとえば，ポテンシャルがなければ

$$H=-\tfrac{1}{2}\Delta=-\tfrac{1}{2}g^{-1/2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(g^{ij}g^{1/2}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) \tag{24-5}$$

である．ただし，$g=\det g_{ij}$．われわれの第一目標は，ここでも正準量子化ではないけれども，つぎの演算子が

$$\hat{q}^i=q^i\ (\text{すなわち，スカラー量}),\quad \hat{p}_i=-i\left(\frac{\partial}{\partial q^i}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial q^i}(\log g)\right) \tag{24-6}$$

の形をとることは知っていてもよい．したがって，単にラプラシアンだけのハミルトニアンH ($v=0$，$a_i=0$) については，

$$\hat{H}=\tfrac{1}{2}g^{-1/4}\hat{p}_i g^{ij}g^{1/2}\hat{p}_j g^{-1/4}=\tfrac{1}{2}\hat{p}_i g^{ij}\hat{p}_j-\tfrac{1}{2}g^{1/4}\Delta g^{-1/4} \tag{24-7}$$

である．

経路積分で基本的に行なう仕事は，無限小時間のプロパゲータの処理である．これが正しくできれば，あとは（どんな名前でよんでもいいけれども，とにかく

$$\lim_{n\to\infty}\left[1+\frac{(x+y_n)}{n}\right]^n=e^x \qquad \lim y_n=0 \qquad) \tag{24-8}$$

を実行するわけだから)，くり返し計算をして，有限時間のプロパゲータにすればよい．経路積分が本当にシュレーディンガー方程式を再現することを確かめるために，4章で無限小時間の時間発展を使った．ここでは，新たに想定するプロパゲータが正しいかどうかをチェックする目的で，無限小時間の時間発展を実行してみる．つまり，

$$H''K=i\hbar\frac{\partial K}{\partial t} \quad \text{ただし}\ t''-t'\to 0 \tag{24-9}$$

となる$K(q'', t''; q', t')$を見つけたい．とりあえず，$\hbar\to 0$と$|t''-t'|\to 0$の極限が本質的に同じ近似を与えるというところから，関数形が推定できる（もちろん，これには，われわれがずっと使っている無限小プロパゲータのもつ関数形が背景にある)．すなわち，つぎの関数形

$$K \overset{?}{=} D^{1/2}e^{iS/\hbar} \tag{24-10}$$

を試してみよう．ここで，Sは，(q', t')と(q'', t'')を結ぶ経路の古典力学の作用積分，DはSの2次微分からできる適当なスカラーの関数［(12-46)式を見よ］．

曲がった空間での経路積分が変わっているところは，(24-10)式が正しくないということである．B.DeWittは，$\exp[i(\hbar^2R/12)t/\hbar]$の項をつけ加える必要があることを発見した．ここで，RはMの曲率脚注(1)．$\Delta t\to 0$と$\hbar\to 0$の極限が一致しないということは新しい発見で，それはそれでよいとして，曲率の項がどういう問題を引き起こすのか知りたい．これは，実験にかかることなのか？　この問題は，1957

脚注(1)　ここで，新たな因子$R/12$と$R/6$，それらにつく符号などについて，注意をしておく．しばしば，(24-10)式のなかの$D^{1/2}$を省いてKを書くことがある．その場合には，$R/12$のかわりに$R/6$を使わなければならない．これは，n次元の曲がった空間では，

$$D(q'', t''; q', t')=(\Delta t)^{-n}g''^{1/2}g'^{1/2}\left[1+\frac{1}{6}R'_{ij}\Delta q^i\Delta q^j\right]$$

$$+\ \text{汎関数積分から落ちる項}$$

となるからである．ただし，記号は以下に定義する．こうして，Dのなかの$R_{ij}/6$も$R/12$の項を与える．また，ある理由（たぶん，正準形式での定義のつごうで）で，(24-5)式とは異なるハミルトニアンが使われる可能性もある．このときには，さらに別の$\pm R/12$の項が出てくる．

年のある研究会でもちだされたが，DeWitt と Wheeler　それに（確か）Feynman の間で討論があり，実験で検証できる望みはないとの結論だった．定数の曲率をもつ空間では，明らかに効果は見られない．というのは，$\hbar^2R$ の項はすべてのエネルギー準位を一定量ずらすだけであり，意味のない位相変化が全体にかかるだけであるからだ．特定の制約がかかった座標（おそらく，分子のなかの相対座標のような）ならば，実効的に，変数の曲率をもつ空間をもつかもしれない，と期待したいところだが，この研究会の参加者たちの結論では，その制約にともなう不確定性が，期待される効果より大きなエネルギーを生みだしてしまうということであった．たぶん，重力場では，$R\hbar^2$ の効果が見られるかもしれない．しかし，現在のところ，この効果は，純粋に理論の世界にだけしか存在しない．

(24-10) 式は否定され，正しい K は，$H-i\hbar\partial/\partial t$ を掛けて Δt の 1 次のオーダーを調べれば得られる，というところまで述べた．今度は，正しい K を示そう．ただし，めんどうな証明は行なわない．

(24-1) 式のラグランジアンに対して，$S_c(q'', t''; q', t')$ を厳密な古典作用積分（経路に沿って $\int L\,dt$ を積分する．ただし，十分小さな $t''-t'$ では，経路は一意的に決まると仮定する）とする．ヴァン・ヴレック行列式を（S の添え字 c は省略）

$$D_{ij}=-\frac{\partial^2 S}{\partial q''^i\,\partial q'^j}$$

$$D=D(q'',t'';q',t')=\det D_{ij} \tag{24-11}$$

と定義する．曲率は，通常の方法で，計量から構成される．つまり，

$$[jk,i]=\tfrac{1}{2}(g_{ij,k}+g_{ik,j}-g_{jk,i})$$

$$R_{ikjl}=\tfrac{1}{2}(g_{ij,kl}-g_{il,kj}-g_{kj,il}+g_{kl,ij})$$

$$+g^{mn}([ij,m][kl,n]-[kj,m][il,n])$$

$$R_{ij}=-g^{kl}R_{ikjl},\quad R=g^{ij}R_{ij} \tag{24-12}$$

これらの，量を使って，プロパゲータは

$$K(q'',t'';q',t')=(2\pi i\hbar)^{-n/2}g''^{-1/4}D^{1/2}(q'',t'';q',t')g'^{-1/4}$$

$$\times e^{i\hbar Rt/12}\exp[iS(q'',t'';q',t')/\hbar] \tag{24-13}$$

で与えられる．ここで，$g''=g(q'')$, $g'=g(q')$, $t=t''-t'$．このプロパゲータに対して，積分の体積要素は，

$$g(q)^{1/2}dq^1\cdots dq^n \tag{24-14}$$

である．

平らな空間では，S は座標の差

$$\Delta^i \equiv q''^i - q'^i, \qquad \Delta t = t'' - t' \tag{24-15}$$

の関数として展開できる．しかし，曲率が入ると，どこで $g_{ij}(q)$ を計算するかで，展開の詳細が変わってくる．S は，「中点」，すなわち $q=(q''+q')/2$, $t=(t''+t')/2$ で計算するのがいちばん簡単である．したがって，今後，g_{ij} も中点で値を計算するものと理解しておく．古典作用積分を近似的に計算すると，

$$\begin{aligned} S(q'', t''; q', t') = \frac{1}{\Delta t}\Biggl\{ &\frac{1}{2} g_{ij}\Delta^i\Delta^j \\ &+ \frac{1}{48}\bigl(g_{ij,kl} - 2g^{mn}[ij,m][kl,n]\bigr)\Delta^i\Delta^j\Delta^k\Delta^l\Biggr\} \\ &+ a_i\Delta^i - v\Delta t \end{aligned} \tag{24-16}$$

で，その誤差は，$\Delta^5/\Delta t$, Δ^3, $\Delta\cdot\Delta t$, $(\Delta t)^2$ のオーダーである．

これでようやく，スピンの経路積分に必要な道具を全部とり揃えた．すなわち，R^3 上を動く外部位置座標と，$SO(3)$ 上の内部スピン座標をもつ系の経路積分である．

ここでは，（外部磁場のない）スピン座標の自由運動だけを考えることにする．したがって，R^3 上の運動はこれには結合することなく，短時間での初期位置と最終位置の関数として扱うことができる．実際には，有限時間の S を計算するのはもっと簡単で，(24-16) 式から計算する必要は全然ない．

23章の方法にしたがって，$SO(3)$ の被覆空間，すなわち，$SU(2)$ の上で経路積分を実行する．あとで，$SU(2)$ 上のプロパゲータの適当な和をとる．$SU(2)$ でのラグランジアンを選ぶ指導原理は，単純さということである．コマで考えれば，いちばん単純なのは，対称コマだ．一方，群論の立場からは，単純さということは，$SU(2)$ の上での自然な計量，つまり左側および右側の並進に対して不変な計量，ということを示唆している．どちらで考えても同じことで，ラグランジアン

$$\left(\frac{1}{I}\right)L = \tfrac{1}{2}\bigl(\dot\theta^2 + \dot\varphi^2 + \dot\psi^2 + 2\cos\theta\,\dot\varphi\dot\psi\bigr) \tag{24-17}$$

（ここで，θ, φ, ψ は普通のオイラー角，I は，「慣性モーメント」）から，不変な距離

$$\Gamma = 2\cos^{-1}\bigl(\tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\,U_2U_1^{-1}\bigr) \tag{24-18}$$

が生ずる．ここで，$U_1, U_2 \in SU(2)$．このことは，オイラー角と $SU(2)$ の行列要素と

の間の関係

$$U=\exp\left(\frac{-i\varphi\sigma_3}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\theta\sigma_2}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\psi\sigma_3}{2}\right) \tag{24-19}$$

（σ_i はパウリ行列）および，自然な計量での測地線は1パラメータの部分群をなす並進運動，すなわち

$$U(t)=\exp\left(-it\omega\hat{\mathbf{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)U(0) \tag{24-20}$$

（ω はあとの便宜のため，つけ加えた）であるという事実から，容易に確かめることができる．対称コマの場合には，その自由運動は，境界条件によって決められる大きさと方向をもった，固定された軸のまわりの回転である．回転不変性から，z 軸のまわりを角度 φ_1 から出発し φ_2 で終わる，時間 T の運動（その間ずっと $\theta=0$）を考えることができる．$(1/I)L(dt)^2$ を計量としてとると，この運動は，明らかに

$$\text{距離}\ =\varphi_2-\varphi_1+4n\pi \tag{24-21}$$

を与える．ここで，n は，全体回転の回転数（この境界条件を満たす古典経路は，無限個ある．また，$n\pi$ に4が掛かっているのは，$SU(2)$ 上では，U が元の位置に戻る間に φ が 4π だけ増加からである．そして，境界条件は，実際は φ ではなく，U によって与えられる）．この境界条件に対して，量 Γ は

$$\begin{aligned}\cos\tfrac{1}{2}\Gamma&=\tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[U_2U_1{}^{-1}\right]=\tfrac{1}{2}\mathrm{Tr}\exp\left[-i\frac{(\varphi_2-\varphi_1)\sigma_3}{2}\right]\\&=\cos\left[\frac{\varphi_2-\varphi_1}{2}\right]\end{aligned} \tag{24-22}$$

を満たす．これで(24-17)式と(24-18)式の関係についてのわれわれの主張が証明された．古典作用積分は，$S=\int_0^t L\,dt$ だから，境界条件 $U(0)=U_1$ と $U(T)=U_2$ について，

$$S=\frac{I\Gamma^2}{2T} \tag{24-23}$$

を得る．ここで，Γ は(24-18)式で与えられる．Γ をオイラー角で表現すると，

$$\begin{aligned}\cos\tfrac{1}{2}\Gamma=&\cos\tfrac{1}{2}(\theta_2-\theta_1)\cos\tfrac{1}{2}(\varphi_2-\varphi_1)\cos\tfrac{1}{2}(\psi_2-\psi_1)\\&-\cos\tfrac{1}{2}(\theta_2+\theta_1)\sin\tfrac{1}{2}(\varphi_2-\varphi_1)\sin\tfrac{1}{2}(\psi_2-\psi_1)\end{aligned} \tag{24-24}$$

となる．因子 $(g')^{-1/4}D^{1/2}(g'')^{-1/4}$ は，S の適当な微分をとって直接計算できる．このように直接計算してしまうと，この量の幾何学的意味が無視されてしまい，別の空間へ経路積分を一般化する方法があいまいになってしまう．この問題については，

またあとでふれる．しかし，たとえ $g'^{-1/4}D^{1/2}g''^{-1/4}$ の深い意味を知らなくても，少なくとも計算だけはできるということだ．最後に，曲率 R も直接計算でき，その値は3/2である．これらの部分部分を全部寄せ集めて（その際，L が I に比例している場合には，曲率に I^{-1} を掛けなければならない），

$$K=\left(\frac{I}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\frac{\Gamma}{2\sin\frac{1}{2}\Gamma}\exp\left(\frac{i\hbar T}{8I}\right)\exp\left(\frac{iI\Gamma^2}{2\hbar T}\right) \tag{24-25}$$

を得る．ただし，K は $SU(2)$ 上のプロパゲータ．その変数は，時刻 $t=0$ と $t=T$ で，それぞれ，U_1, U_2 であり，Γ は(24-18)式で与えられている．もちろん，(24-18)式には多数の解がある．$T\to 0$ に対しては，(24-25)式に現われるべき解は，絶対値が最小で，$K\to$ デルタ関数となるものである．Γ を特定するのに，こんなやり方をしていたのでは，不便である．というのは，最終位置は $SU(2)$ の上を動くから，選んだ Γ が途中で切り替わる必要性があるかもしれないからである．原理的には，われわれがほしいのは，$T\to 0$ のプロパゲータだけである．この極限では，(24-18)式の解は，最小のものを除けば，すべて重要ではない．ここでは，これらのすべて最小値の場合の和だけをとって，K としてもよい．$U(T)$ の異なった値はこれで考慮されるので，過不足なく和をとるという問題は，これで解決する．$SU(2)$ のプロパゲータは，こうして

$$K_{SU(2)}(U_2,T;U_1,0)=\left(\frac{I}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{\Gamma+4n\pi}{2\sin\frac{1}{2}\Gamma}\exp\left\{\frac{i\hbar T}{8I}+\frac{iI(\Gamma+4n\pi)^2}{2\hbar T}\right\} \tag{24-26}$$

と計算される．ただし，Γ は(24-18)式のあるはっきりした（しかし，任意の）解である．$SU(2)$ は単連結だから，和のなかに入ってくる相対位相については問題ない．$SO(3)$ のプロパゲータは，23章の処方箋にしたがって求めることができる．基本群は Z_2（2個の要素からなる一意的な群）で，その2つの表現は，自明かつ忠実な表現である．したがって，2つの可能な $SO(3)$ プロパゲータが存在する．ここでは，23章の記号にこだわらないでこれを表わすことにする．$SO(3)$ プロパゲータは，変数として $SU(2)$ の要素をもち（これでもなにもあいまいなことは起きない），その被覆射影の2つの原像を $+U$ と $-U$ で表わそう．2つのプロパゲータを区別するために，上つきの記号(±)を使って，

$$K^{(\mp)}_{SO(3)}(U_2,T;U_1,0)=K_{SU(2)}(U_2,T;U_1,0)\pm K_{SU(2)}(-U_2,T;U_1,0) \tag{24-27}$$

と書く．(24-26)式およびΓの定義から，(24-27)式は

$$K^{(\mp)}_{SO(3)}=\left(\frac{I}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{i\hbar T}{8I}\right)\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{\Gamma+2n\pi}{2\sin\frac{1}{2}\Gamma}(\pm)^n\exp\left(\frac{iI(\Gamma+2n\pi)^2}{2\hbar T}\right) \tag{24-28}$$

となる（(24-27)式のKの定義で，符号が逆向きについていた理由は，いまや明らかである．因子の$\sin(\Gamma/2)$もΓが2πだけふえると，符号を変えるからである）．

(24-28)式を，通常のシュレーディンガー方程式の手法で計算されるプロパゲータと比較してみるとおもしろい．驚くのは，(24-28)式の$K_{SO(3)}$が$T\to 0$に対して正しいというだけではなく，すべてのTに対して厳密に正しいということである（すぐあとで確かめる）．$SO(3)$上の測地線運動は，この意味において，R^3上の自由運動と同じくらい「単純」といえる．

プロパゲータの計算には，(7-6)式を利用する．これに$SO(3)$上のシュレーディンガー方程式の固有関数を含ませる．それは本質的にその群上のラプラシアンであるから，波動関数は，ちょうど表現行列になっている．再び座標として$SU(2)$の要素を使うと，波動関数はj, m, k；$j=0, 1/2, 1, 3/2, \ldots, -j\leqslant m, k\leqslant j$を使ってラベルされる．規格化された固有関数と固有値は，

$$\left(\frac{2j+1}{8\pi^2}\right)^{1/2}D^{j*}_{mk}(U),\qquad E_{jmk}=\frac{\hbar^2}{2I}j(j+1) \tag{24-29}$$

である．グリーン関数は，整数か半整数の一方のjを足しあわせて得られる．万が一，1つの和のなかにすべてのjを含めてしまうとすると，2πの回転によって，整数と半整数のスピン波動関数の相対位相が変わってしまい，それによって物理的変化が起きてしまうことになる（これが超選択律）．可能な2つのグリーン関数は，

$$G^{(\pm)}(U_2,T;U_1,0)=\sum_{j,m,k}\frac{2j+1}{8\pi^2}D^{j*}_{mk}(U_2)D^{j}_{mk}(U_1)\exp\left(\frac{-i\hbar T}{2I}j(j+1)\right) \tag{24-30}$$

である．ここで，上側の符号は，整数のjを足しあわせ，下側は，半整数のjを足しあわせることを意味する．Dが，群のユニタリー表現になっているということから，重要な単純化が起きて，どんなjに対しても

$$\sum_{mk} D^{j*}_{mk}(U_2) D^j_{mk}(U_1) = \sum_{mk} D^{j*}_{mk}(U_2) D^{j*}_{km}(U_1^{-1})$$
$$= \sum_m D^{j*}_{mm}(U_2 U_1^{-1}) = \mathrm{Tr} D^{j*}(U_2 U_1^{-1}). \tag{24-31}$$

となる．トレース演算は相似変換に対して不変であるから，D^jを対角にとることができる．(24-20)式において，U_2とU_1によって定義された方向$\hat{\boldsymbol{n}}$に沿ってz軸を選んだ場合には，これが該当する．その場合，$D^j_{m\,m}(U_2 U_1^{-1}) = \exp(im\Gamma)$で，$\Gamma$は(24-18)式のもの．すると，

$$\mathrm{Tr} D^{j*}(U_2 U_1^{-1}) = \frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\Gamma}{\sin\frac{1}{2}\Gamma} \tag{24-32}$$

および

$$G^{(\pm)} = \frac{-2}{\sin\left(\frac{1}{2}\Gamma\right)} \frac{1}{8\pi^2} \frac{\partial}{\partial\Gamma} \sum_j \cos\left[\left(j+\tfrac{1}{2}\right)\Gamma\right] \exp\left(\frac{-i\hbar T}{2I} j(j+1)\right)$$
$$\equiv \frac{-2}{\sin\left(\frac{1}{2}\Gamma\right)} \frac{1}{8\pi^2} \frac{\partial}{\partial\Gamma} g_{\pm}, \quad \begin{array}{l} g_+ \text{ に対して } j=0,1,\ldots \\ g_- \text{ に対して } j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\ldots \end{array} \tag{24-33}$$

が出る．ただし，

$$g_+ = \tfrac{1}{2}\theta_2\left(\tfrac{1}{2}\Gamma, -\frac{c}{\pi}\right) e^{ic/4} = \tfrac{1}{2} e^{i\Gamma/2} \theta_3\left(\tfrac{1}{2}\Gamma - \tfrac{1}{2}c, -\frac{c}{\pi}\right),$$
$$g_- = \tfrac{1}{2} e^{ic/4}\left[\theta_3\left(\tfrac{1}{2}\Gamma, -\frac{c}{\pi}\right) - 1\right] \tag{24-34}$$

で，さらに，$c = \hbar T/2I$．関数$g_{\pm}$は，ヤコビのテータ関数である．これから，S^1上の自由運動という，はるかに簡単なケースとの強い平行性が引きだされる．

事実，この平行関係には，形式的に似ているということ以上の内容が含まれている．(24-28)式に続く議論は，経路積分のプロパゲータ［(24-26)式から(24-28)式まで］と通常のそれ［(24-34)式］を比較するために行なった．$K^{(\pm)}_{SO(3)}$は，テータ関数として簡単に表現でき，それらが$G^{(\pm)}$と等しいということは，テータ関数の基本定理［(23-13)式］から出てくる．そして，この定理が，自由粒子の運動ともつながっている．

以上で，スピンのための経路積分をつくりだす作業は，ほぼ終了した．通常のス

ピン理論であれば，1つの値に決まったスピンの粒子の発展方程式を書きおろすところである．一方，われわれのプロパゲータは整数であろうと半整数であろうと，いろんなタイプのスピンをもつ状態に応用できる．われわれの理論から，射影によって通常の理論を再現することもできる．

外部磁場のなかでは，古典ラグランジアンに，場と角速度のカップリングの項が含まれるので，最終的には，異なった全スピンではなくて，異なった値の m [(24-29)式参照] と結合するプロパゲータが問題になる．この説を検証する余裕はないが，そのかわり，Bopp，Haag，Rosenの論文を参照していただきたい．彼らは，磁場がある場合も含めて，対称コマを通常の方法で量子化した．

$SO(3)$ の量子化に関するわれわれの結果から，つぎの示唆に富む結果が得られた．まず，(24-28)式の $K_{SO(3)}$ は，$|t''-t'|\to 0$ のときにだけ正しいものとして議論を進めてきたが，G と比較した結果，実は厳密解であることがわかった．2番目に，プロパゲータ自身がヤコビのテータ関数と簡単な関係をもっており，エネルギー展開 (G) から経路積分 (K) へ移行するには，テータ関数の基本定理を使いさえすればよい．S^1 上の自由粒子との類似性に基づいて合理的に推定できることは，群多様体上の自然な計量をもつ測地線運動は「自由運動」であり，この点に関して，$SO(3)$ が特別な存在ではない，ということである．

結局，古典経路の和（“K”に類似の量）は，単純リー群の群多様体をも含む大きなクラスの空間で，厳密解を与えることがわかった．さらに，テータ関数，しかも多変数関数に拡張された形のテータ関数，は再びプロパゲータと簡単な関係をもっている．これらのめざましい結論は，Dowkerによって証明された．彼は，(24-13)式のプロパゲータに現われた関数 $g'^{1/2}D^{-1}g''^{1/2}$ が，Ruseの不変量になっていることを示した．彼は，さらにこれを群（その群多様体上で経路積分を実行したいわけだが）の表現の指標と関係づけ，群の表現論のいろいろな結果をつなぎあわせ，それをまた偏微分方程式との関係で議論して，最終結論にたどりついたのだった．

ノート

以下は，曲がった空間での経路積分の部分的な伝記的な文献である．

Wolfgang Pauli, Pauli Lectures on Physics, *Vol. 6, Selected Topics in Field Quantization*, C. P. Enz, Ed., MIT Press, Cambridge, Mass., 1973, Ch. 7

C. Morette (Morette-De Witt), *Phys. Rev.* **81**, 848 (1951)

B. S. De Witt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957)

S. F. Edwards and Y. V. Gulyaev, Path Integrals in Polar Coordinates, *Proc. Roy. Soc. Lond.* A **279**, 229 (1964)

L. S. Schulman, A Path Integral for Spin, *Phys. Rev.* **176**, 1558 (1968)

A. M. Arthurs, *Proc. Roy. Soc. Lond.* A **318**, 523 (1970)

D. W. McLaughlin and L.S.Schulman, *J. Math Phys.* **12**, 2520 (1971)

J. S. Dowker, Covariant Schrödinger Equations, in *Functional Integration and Its Applications*, A. M. Arthurs, Ed., Oxford, 1975

曲がった空間での経路積分に関する論文は多く，すべてリストアップしようなどとは思わない．正しい論文もあれば，疑わしいものもある．オリジナリティーに富んだものもあれば，あまりほめられないものもある．

$SO(3)$のプロパゲータについて，古典経路の和が厳密解を与えることを示したこと，および，この性質がリー群に対しても一般に成立するという予想は，私の学位論文（プリンストン大学1967年）に載っている．このうち，かなりの部分が，*Phys. Rev.* **176**, 1558 (1968)に出版されている．古典経路の和の厳密性の証明と，テータ関数を使ってプロパゲータを評価した研究は，

J. S. Dowker, *J. Phys.* A **3**, 451 (1970)

J. S. Dowker, *Ann. Phys.* **62**, 361 (1970)

にある．

ここまでの3つの章では，被覆空間から射影することによって，多重連結空間上でのプロパゲータKを求めた．つまり，Kは，いくつかの項の和で，そのおのおのは物理空間のコピーから出てくるものであり，これらを足しあわせて境界条件をつくりだすことができる．近似ではあるが，いくつかの古典経路が入手できれば，同じような描像がWKBのプロパゲータでも可能である．これらの経路をαを使って区別することにすると，(3-7)式のように，

$$G_{WKB}(x, t; y) \sim \sum_{\alpha} \sqrt{\frac{\partial^2 S_\alpha}{\partial x \partial y}} \ \exp[iS_\alpha(x, t; y)/\hbar]$$

である．一般に，ハミルトン - ヤコビ方程式の解である$S_\alpha(x, t; y)$は，1つの多価関数のブランチであって，そのブランチは焦点（たとえば，15章(p.121)の単純焦点$S \sim (\Delta b)^{3/2}$の近傍）で発生する．したがって，Sが，xの関数としてその上で1価になるようなリーマン面$\mathfrak{R}$が存在する．ここでアナロジーを行なう．$\mathfrak{R}$の上で経路積分を行ない，どのxについても，xを被覆する面の1枚1枚からの寄与を足しあわせることによって，Kを得る．WKBは焦点でだめになるから，コースティクス

での K は，全面的には S では決まらない．

25章 相対論的プロパゲータとブラックホール

簡単なトリックを使えば，相対論的なスピンなし粒子のプロパゲータを書きおろすのは簡単なことである．スピンがある場合には，むずかしいことになるが，しかし，これはよく知られた話ではある．

この章では，その簡単なトリックについて説明し，最近の応用，すなわちブラックホールからの量子論的なエネルギーの輻射について簡単に解説する．この応用では，実際にかなり経路積分の特別なテクニックが現われる．また，曲がった空間でのプロパゲータが必要であるうえ，一種のポテンシャル障壁への透過を行なわせるため，古典作用積分の解析接続もあわせて考えなければならない．しかし，残念ながら，曲がった空間のプロパゲータの実際の応用は，ゼロ曲率の計量の場合だけで，24章で議論した曲率項のテストにはならない．

まず，平らな（ミンコフスキー(Minkowski)）空間（$g_{\mu\nu}=\mathrm{diag}(1, -1, -1, -1)$）上で電荷$e$をもつクライン - ゴードン(Klein-Gordon)粒子を考える．ベクトルポテンシャル$A^{\mu}(x)$によって記述される外部電磁場があるときには，その波動関数は

$$\left(i\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}-eA_{\mu}\right)^{2}\psi(x)=m^{2}\psi(x) \tag{25-1}$$

を満たす．先に進む前に，(25-1)式には断っておかなければならないことがある．クライン - ゴードン方程式，あるいはディラック方程式，を1体方程式と考えると，あらゆる概念的な問題が発生する．たとえば，負エネルギー状態，空孔，その他諸々のアイデアなど，場の理論をじっくり勉強したあとでなら消えていきそうな神がかり的な概念がそうである．

いまのわれわれの目的では，(25-1)式を1体方程式とみなす．Fockが導入した5番目のパラメータを使って，Feynmanは（時間に関して）2階のクライン - ゴードン方程式を，形式的に，1階のシュレーディンガー方程式に似た形に焼き直そうとした．

$\varphi(x^\mu, \lambda)$ を5変数の関数とし，それが方程式

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial\lambda}=-\tfrac{1}{2}\left(i\frac{\partial}{\partial x^\mu}-eA_\mu\right)^2\varphi \tag{25-2}$$

を満たすとする．関数 A_μ は λ に依存しないから，(25-2) 式は $\varphi(x, \lambda)>=\exp(im^2\lambda/2)\psi(x)$ の形の解をもつ．ここで，$\psi(x)$ は(25-1) 式を満たす関数．(25-2) 式がシュレーディンガー方程式によく似ているということは，なにも考えないで数学的アナロジーをやっても構わないということを意味している．つまり，(25-2) 式のプロパゲータは，4次元空間のなかで，5番目のパラメータを使って表わされる運動軌跡 $x^\mu(\lambda)$ に沿って動く古典粒子の経路積分として表わすことができる．この運動のラグランジアンは，

$$L=\tfrac{1}{2}\left(\frac{dx^\mu}{d\lambda}\right)^2+e\frac{dx^\mu}{d\lambda}A_\mu \tag{25-3}$$

である．もし，(25-1) 式のプロパゲータがほしければ（しばしばその場合が多いが），(25-2) 式のプロパゲータの経路積分表示を λ についてフーリエ変換すればよい．ちょうど，$G(x, t\,;y)$ と $G(x, y\,;E)$ の関係に似ている．したがって，

$$G(x''^\mu, x'^\mu; m)=\int_0^\infty d\lambda \exp\left(\frac{-im^2\lambda}{2}\right)\sum_{\substack{x^\mu(\lambda)=x''^\mu\\ x^\mu(0)=x'^\mu}}\exp\left(i\int_0^\lambda L(x(\lambda'))\,d\lambda'\right) \tag{25-4}$$

と書ける（この手続きは，20章で説明した電磁波の経路積分と形式的に同じもの）．

少し前のほうで，あまり良くいわなかったが，時間軸を逆向きに進む粒子として「負エネルギー状態」を考えるというアイデアは，ここでの定式化から自然に出てくることなのである．自由粒子 $(A^\mu=0)$ に対して，(25-2) 式のプロパゲータは

$$G(x'', x'; \lambda)=(2\pi^2\lambda^2 i)^{-1}\exp\left[-\frac{i(x''-x')^2}{2\lambda}\right] \tag{25-5}$$

である．境界値が $x''^0-x'^0=t''-t'<0$ だとしてみよう．つまり，（λ における）「最終時刻」のほうが，（λ における）「初期時刻」よりも，（t においては）「早い」ものとする．このとき，波動関数と考えた G はエネルギー演算子の固有関数になっていて，

$$i\frac{\partial G}{\partial t''}\sim i\frac{\partial}{\partial t''}e^{-i(t''-t')^2/2\lambda}=\frac{t''-t'}{\lambda}e^{-i(t''-t')^2/2\lambda} \tag{25-6}$$

を満たす．ここで，$(t''-t')/\lambda$ は負の固有値である．電子 - 陽電子消滅についても，うまい描像が得られる．同じ時刻 $t=x''^0=x'^0$ で2点 x'' と x' をもつプロパゲータを

考える．ある時間たってから，電磁場 A が大きな値をとるとする．このとき，x' を ($\lambda=0$ で) 出発し，「前向きに」(すなわち $\partial t/\partial\lambda>0$ に) 未来に向かって伝播し，A で散乱され，「後ろ向き」($\partial t/\partial\lambda<0$，ただし，$\lambda$ は常に増加する) に反射される，一連の古典経路からの寄与がプロパゲータに大きく効くと期待される．図25-1を見よ．数学的には，この状態は，空間で運動量をもっている粒子が，壁につきあたって，逆向きの運動量をもって跳ね返されくる状況と，なんら変わりない．保存則についていうと，堅いポテンシャル障壁の近似では，ポテンシャルが運動量変化を吸収したと考えればよい．それと同じことで，図25-1の過程を粒子 - 反粒子消滅と解釈するならば，外部電磁場があまったエネルギーと運動量を吸収していることになる．

このように考えると，Kleinのパラドックスの，隠れた結論に到達するにも便利である．これらの議論が重いのは，負のエネルギー状態を捨て去ることができないということである．つまり，正の振動数の関数だけのヒルベルト空間に議論を限定しようと思っても（そうやって，解釈の問題をむりやり避けようと思っても），ダイナミックスを考えると途端に，負のエネルギー状態が自ら姿を現わす．これは，

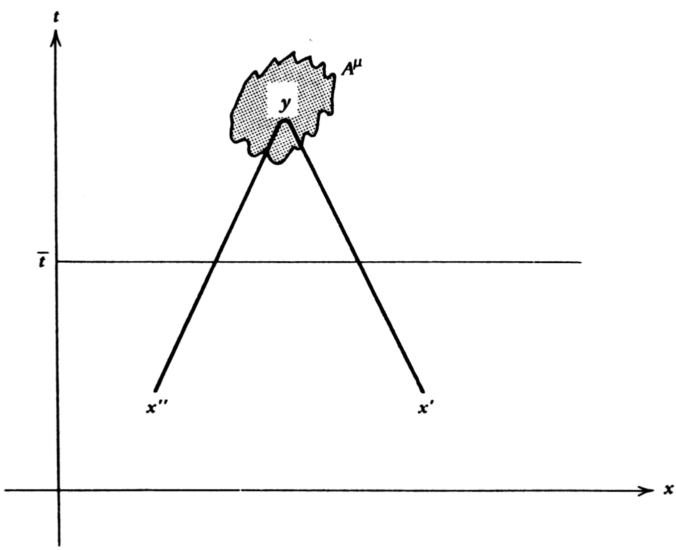


図25-1　粒子が点 x' を「出発」し，A^μ の存在下で点 y で散乱され，x'' に「戻って」くる．あるいは，粒子が（過去に）x' を離れ，その反粒子が x'' を出発する．これらは点 y で出会い消滅する．その際のエネルギーと運動量は電磁場 A^μ に吸収される．

もし$x''^0>x'^0$で$G(x'', x'; \lambda)$を考えれば明らかである．つまり，もし，あとの時刻に大きな場があるとすると，すべてのλに対して，$dt/d\lambda>0$の経路からの寄与がプロパゲータにおよぶだけではなく，x''^0より先の未来に経路が進み，大きなAにあたって跳ね返される経路の寄与もあるからである．

この理論で直感がきくもう1つの概念は，オフ質量シェル(off the mass shell)の散乱である．質量mのプロパゲータはフーリエ変換，(25-4)式で得られるが（自明ではないA^μに対して）$(dx^\mu/d\lambda)(dx_\mu/d\lambda)$が$m^2$になるとはかぎらない経路からの寄与も存在する．この点に深入りすることはしないが，非相対論的散乱理論でオフ・エネルギー・シェルの寄与があるのと同じように，不思議なことではないとだけいっておこう．

この理論は，ありあまるほど直感に訴える力をもつ一方，1体方程式として考えることの限界も教えてくれる．いま，図25-1の時刻$\bar{t}$で，空間面をとったとすると，明らかに，1個ではなく，2個の粒子が見えるはずである（実際，全宇宙の電子と陽電子は，たった1個の電子の，遠い未来と過去からの無数の$dt/d\lambda$の反転を見ているのではないかと推測したのは，Feynmanだったと思う）．われわれには空間的時空を見ることが合理的だという先入観（この先入観は非相対論での空間面とは平行にはいかないが）があるから，「1個」の粒子の生成と消滅を考えざるをえないのだ．もう1つ解決しなければならない問題は，場の理論への単なる導入以上のもので，粒子が外場とだけではなく，互いに相互作用するときに出てくる．この場合，図25-1の折れ線の2つの部分が，互いに相互作用しなければならないのか，そうではないのか，疑問の余地がある．

この定式化に関連して，私にはその物理的な重要さがはっきりしないが，数学的な問題があることを指摘しておきたい．相対論でも非相対論でも発展方程式には形式的類似性があるとはいうものの，「許される」波動関数の性質については違いがある．非相対論的量子力学の場合，もちろん$\int|\psi(x, t)|^2d^3x<\infty$を要求する．しかし，(25-2)式の解に対して，$\int|\varphi(\boldsymbol{x}, t; \lambda)|^2d^3xdt<\infty$を要求するのは不適当だろう（と私は思う）．つまり，クライン‐ゴードンの波動関数に確率解釈を適用するのは問題がある．たとえそのような確率解釈に到達することが可能であったとしても，いずれにせよ，遠い未来や過去において粒子が消滅してしまうというような要請を含んでいてはならないはずである．

ここで述べた方法は，スピンを含むどんなことでも経路積分の文脈で処理できることなら，ディラック粒子にも有効である．ディラック方程式を「2乗」すると，

$$\left(i\frac{\partial}{\partial x_\mu}-A^\mu\right)^2\psi-\frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\psi=m^2\psi \tag{25-7}$$

が得られる．ここで，$F^{\mu\nu}$は電磁場で，$\sigma_{\mu\nu}$は（本質的に）γ行列の交換子である．ここでもm^2を$-2i\partial/\partial\lambda$で置きかえれば，得られる方程式は，スピンつきの粒子のためのシュレーディンガー方程式に形式的に似ており，(22-2)式のハミルトニアンに対して行なったのと厳密に同じように（不器用だが）処理することができる．

つぎに，相対論的プロパゲータを曲がった空間に応用してみよう．物理的な問題として関心があるのは，ブラックホールからの輻射である．ブラックホールについて最初に習うことは，その名の由来どおり，なにもかも吸いこんでしまうということであるから，放出も可能であるというと驚くかもしれない．しかし，放出が許されないというのは，古典論での話しであって，以下で導く放出は量子論的トンネル過程の結果なのである．

実際には，以下で説明する放出機構が考えられる以前から，ブラックホールから輻射があると期待される理由があった．ブラックホールのある種の性質は，熱力学を使うことによっていちばんよく理解できる．そして，熱力学の類推をできるかぎり使おうとすると，ある種の放出を考える必要性が出てくる．特に，Bekensteinは，ブラックホールどうしが衝突しても，事象の地平の面積は決して減少しえないという事実から，事象の地平の面積（の定数倍）はエントロピーと同一視することができ，面積の大きさが減少しないということは，熱力学第2法則の1つの表現になっている，と考えた．彼は，第2法則を一般化し，ブラックホールのエントロピーと通常のエントロピーの和が減少しない，と定式化した．さらに進んで，ブラックホールが平衡に近い状態では，第1法則の類似性もあって

$$dM=\frac{\kappa}{8\pi}dA+\Omega\,dJ \tag{25-8}$$

の関係がある．ここで，Mはブラックホールの質量，ΩとJは角速度と角運動量．Aは，面積の大きさ，κは表面重力で$1/4M$に等しい．これを普通の第1法則および第2法則と比較すると，$\kappa\,dA/8\pi$が$T\,dS$に対応する量になっていると考えることができる．こうして，がっちりつながったアナロジーの連鎖をたどっていくと，温度をブラックホールに結びつけることができる．この温度は，κの定数倍に等しい．ここまでの類推をすべてまじめに受けとるならば，ブラックホールからのエネルギー放出を認めないわけにはいかない．というのは，ブラックホールが，上に述べた意味での温度をもち，ほかの通常の物体とこの数値の温度で，平衡状態にあると想

像してみよう．本当にそれらが平衡ならば，片方から相手方へのエネルギー流は互いに同じでなければならない．通常の熱力学で考えられるのと同じで，このエネルギー流がゼロだという理由はなく，なんらかのエネルギー流出がブラックホールからもあると考えなければならない．

放出するメカニズムは，いろいろな方法で説明できる．平凡に考えて，ブラックホールの近傍の強烈な重力場が粒子 - 反粒子対をつくりだし，この対の片割れがホールに落ちこんでいくと同時に，もう一方が外へ逃げ出し，これを外側から観測するわれわれからは，「ブラックホールからの輻射」と解釈することもできる．これは，重力場の量子化とは関係ない．ここでの重力場は，古典的な外場であり，粒子対生成は，原理的に，量子化されていない「外部」電磁場による対生成にほかならない．

本章で示した概念を使って，この生成過程を，より図式的に説明することができる．粒子の軌跡は5番目のパラメータを使って記述できる．上で説明した粒子 - 反粒子対生成は，つぎのように考えることができる．すなわち，1粒子がブラックホールのなかで，ある未来に出発し，時間をさかのぼってブラックホールの外側まで伝播し（そのような古典軌道は実際に存在する），そこで強い重力場によって散乱されるが，それが非常に激しいので $dt/d\lambda$（前と同じ意味の記号）が逆向きになり，今度は，粒子は時間に順（前）方向に進んでブラックホール外の観測者に到達する．さらに，ホールのなかである未来に「始まった」（すなわち λ の最小値の）軌跡は，ホールのなかでそれより前の λ（したがって，あとの t）に接続し，ブラックホールの $r=0$ での特異点にまでいたることができる．こうして，外側で観測された粒子は，$r=0$ での特異点から出てきたと考えてもよい．図25-2を見よ．

いま説明した過程のプロパゲータを計算すると，非常にきれいな解析接続が含まれることがわかる．ここでは計算の最小限を説明するだけだが，それでも，シュワルツシルトの計量を少し詳しく述べておく必要がある．t が時間，(r, θ, φ) は空間の極座標で，計量は

$$g_{tt}=1-\frac{2M}{r} \qquad g_{rr}=-\left(1-\left(\frac{2M}{r}\right)\right)^{-1}$$
$$g_{\theta\theta}=-r^2 \qquad g_{\varphi\varphi}=-r^2\sin^2\theta \tag{25-9}$$

のように入る．ほかの成分はすべてゼロ．M は，この重力場をつくる質量である．よく知られているように，点 $r=2M$ は（g_{rr} の形にもかかわらず），測地線（これは座標の選び方によらない）がなにも，つごうの悪いふるまいをしない，という意味で，特異点ではない．唯一の特異点は，$r=0$ にある．ここで便利な座標系は，

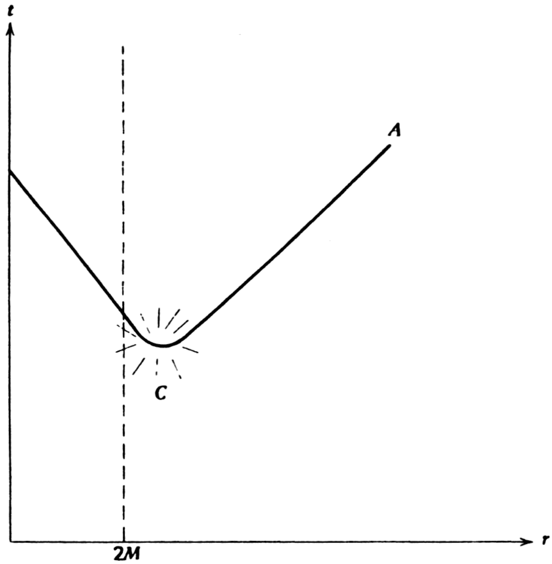


図25-2　ブラックホール特異点で負のエネルギー状態 $(dt/d\lambda<0)$> で「発生」した粒子が，点Cにある強い重力場に「跳ね返され」て，外側にいる観測者Aへとプロパゲートする．tは時間，rは動径座標．

Kruskalがつくったものである．この座標系では，すべてのパラメータが可能なかぎり大きく拡張されたとき（ある意味で，もと元のシュワルツシルト空間の2つのコピーを与える），すべての測地線は，特異点 $r=0$ で終るものを除けば，無限に接続することができる．

クルスカル座標では，θとφは前と同じものだが，rとtは

$$v=\left[\frac{r}{2M}-1\right]^{1/2}\exp\left(\frac{r}{4M}\right)\sinh\left(\frac{t}{4M}\right)$$

$$u=\left[\frac{r}{2M}-1\right]^{1/2}\exp\left(\frac{r}{4M}\right)\cosh\left(\frac{t}{4M}\right) \tag{25-10}$$

のように変換される．図25-3に，u - v面において，rが一定の面（双曲線）と，tが一定の面（直線）を示した．図25-4には，上で述べたようなブラックホールからの放射を記述する軌跡の1つを示した．最終的にはAに到達する粒子は，点Cで

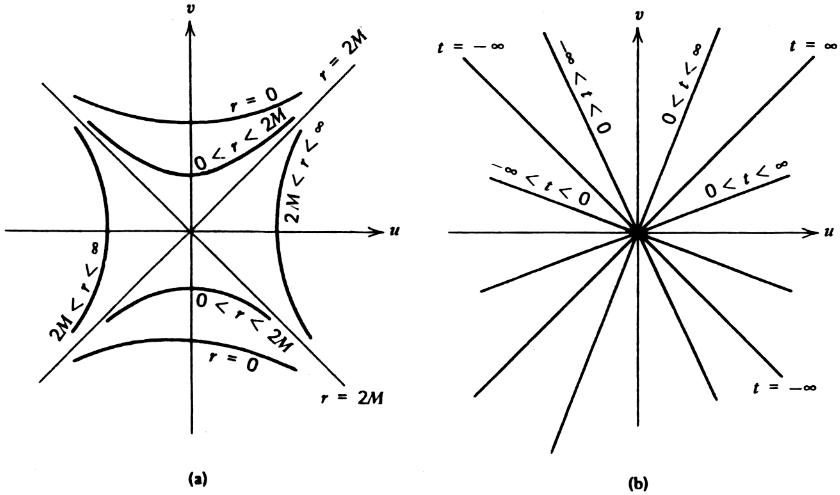


図25-3　クルスカル座標系で，(a) rの等しい値を結ぶ曲線と，(b) 等時間(t)曲線．各点(u,v)は球面の点を表わす ($0\leqslant\theta\leqslant\pi, 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$)．

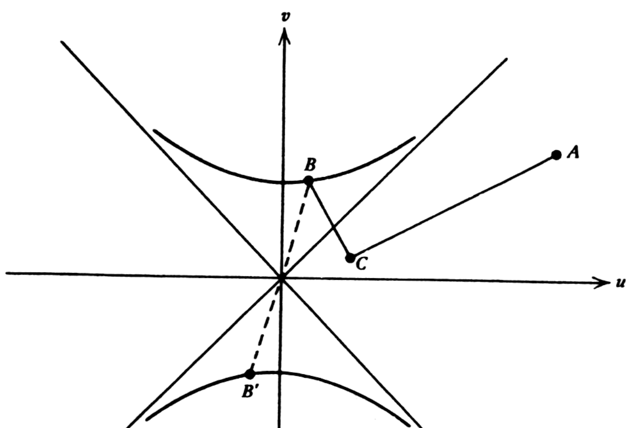


図25-4　ブラックホールから「放出」された粒子が，観測者Aに到達するまでの軌跡BCA，解析接続によって，この経路の振幅は，Aを出発しB'に到達する粒子の振幅に関係づけられる．

強い重力場により散乱され，（λ が一番若い値だという意味で）点 B に源を発するようにつながっている．いちばん最初に説明した対生成の解釈にしたがえば，点 C で対が生成し，片割れの一方が，点 B へ，もう一方が A へと動いたということになる．

ミンコフスキー空間について前に説明したように，粒子が x_B から x_A へいくプロパゲータは

$$G(x_A;x_B)=\int_0^{\infty}e^{-im^2\lambda/2}G(x_A,x_B,\lambda)\,d\lambda \tag{25-11}$$

で，$G(x_A,x_B;\lambda)$ はシュワルツシルトの計量を使って

$$G(x_A,x_B;\lambda)=\sum_{x(\cdot)}{}_{\substack{x(0)=x_A\\ x(\lambda)=x_B}}\exp\left(i\int_0^{\lambda}\tfrac{1}{2}g_{\mu\nu}\frac{dx^{\mu}}{d\lambda}\frac{dx^{\nu}}{d\lambda}d\lambda\right) \tag{25-12}$$

と書かれている．さらに，A にいる観測者は，固定されたエネルギーをもつ特定の状態の粒子に注目している．この確率振幅を f とする．これは，(25-11) 式の G のフーリエ変換そのもの．したがって，

$$f(\mathbf{R}_A,\mathbf{R}_B)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{-iEt}G(0,\mathbf{R}_A;t,\mathbf{R}_B)$$

あるいは，x_A と x_B の交換に関する対称性を使って，

$$f(\mathbf{R}_A,\mathbf{R}_B)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{-iEt}G(t,\mathbf{R}_B;0,\mathbf{R}_A) \tag{25-13}$$

となる．これで，必要な量をすべて定義した．さて，G からなにがいえるだろうか．

いま調べたい第1のこと，つまり，ブラックホールの温度と放射の関係は，G の解析性だけを基にして議論できることがわかる．Hartle と Hawking は半古典論を使って，複素時間 t の関数として，G は，t 軸の下 $4\pi M$ の幅の帯状領域で解析的であることを証明した．さらに，この帯状領域のすぐ上と下には，長さゼロの測地線による特異点があることも示した．これについては，ここでは必要ない．(25-13) 式の積分経路は，したがって，$4\pi Mi$ だけ下側に，f の関数形を変更しないで変形できる．新しい変数 $t+4\pi iM\to t$ に移ると，f は $(\kappa=1/4M)$

$$f(\mathbf{R}_A,\mathbf{R}_B)=e^{-\pi E/\kappa}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{-iEt}G\left(t-\frac{i\pi}{\kappa},\mathbf{R}_B;0,\mathbf{R}_A\right) \tag{25-14}$$

となる．この変数変換が美しいのは，クルスカル座標で「時間」$t-i\pi/\kappa$ が実数の物理的な u と v（あるいは，t と r）に対応するからである．したがって，元の物理的過程は，振幅項と関連して，因子 $\exp(-\pi E/\kappa)$ をもつ別の過程に関係づけられた．

(25-10)式から明らかなように，$t \to t - i\pi/\kappa$ は，$u \to -u$ および $v \to -v$ と変更する．したがって，このプロパゲータは，(u-v 座標の原点について B とは対称の位置にある) B' で放出された粒子（図25-4参照）が，A で受けいれられたと，記述している．しかし，時間反転の対称性から，この振幅は，粒子が A で放出され B' に到達する振幅と（符号を含めて）同じである．この量の絶対値の2乗は，ブラックホールによる吸収確率である．よって，(25-14)式とその解釈から，

$$
\begin{aligned}
&(\text{エネルギー}E\text{の粒子が放出される確率})\\
&\quad=\exp\left(\frac{-2\pi E}{\kappa}\right)\times(\text{この状態の粒子が吸収される確率})
\end{aligned}
\tag{25-15}
$$

と結論できる．この関係式は温度 $T = \kappa/2\pi k_B$（k_B はボルツマン定数）の黒体に特徴的なものである．こうして，ブラックホールに温度を割りあてることが正当化できる．

ここでは，G の解析性の証明には立ちいらない．Hartle と Hawking がとった方法は，λ を純虚数に解析接続して，シュレーディンガー方程式というよりも拡散方程式を得るというものである．また，同じような解析接続を t についても行ない，ダランベルシアン(D'Alembartian)をもった双曲型の波動方程式を，ラプラシアンを含むよりあつかいやすいものに変換した．彼らは，理論的推論のなかで，経路積分の「言語」をしばしば使っている．実際，拡散方程式またはシュレーディンガー方程式の漸近解が，計量つきの測地線，つまり古典軌道で与えられることを利用している．偏微分方程式の漸近解に関するその他の一般的な性質も，もちろん使っている．理論のすべてを説明することは，本書の範囲を越えているので，興味のある読者は，原論文を参照していただきたい．

ノート

クライン - ゴードン方程式およびディラック方程式への相対論的プロパゲータについてのFeynmanの仕事は，

R. P. Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction, *Phys. Rev.* **80**, 440 (1950), App. A

R. P. Feynman, An Operator Calculus Having Applications in Quantum Electrodynamics, *Phys. Rev.* **84**, 108 (1951), App. D

に与えられている．(25-7)式にしたがえば，スピンつき粒子の相対論的経路積分は

22.1節で述べた積積分の方法でもとり扱うことができる．連続スピンモデルを相対論的経路積分にくりこむことができ，さらに，22.2節の考えが追究できるかどうか，考えてみる価値がある．何年か前に，私はスピンモデルと相対論的経路積分をつくろうとやってみたことがあるが，このスピンを外場と相互作用させる段階になって，困難に陥ってしまった．スピンモデルについては，

L. S. Schulman, Relativistic Spin : Tops and Wave Equations, *Nuclear Phys.* **B18**, 595 (1970)

に説明した．（非相対論の場合に説明したように）スピン座標は，*SO*(3)の群多様体であるが，いまの場合には，これらの座標が空間座標から明確に分離できない(本質的にブースト(boost)と回転が相対論的に交換可能ではないから)．相互作用していない粒子については，プロパゲータの経路積分は書きおろすことができる．しかし，相互作用がある場合については，理論が完成していない．この問題に対する悪戦苦闘ぶりは，プリンストン大学に提出した私の学位論文（1967年）に載っているが，まだ論文として印刷されていない．

ブラックホールの熱力学は，

J. D. Bekenstein, Black Holes and Entropy, *Phys. Rev. D* **7**, 2333 (1973)

J. D. Bakenstein, Generalized Second Law of Thermodynamics in Black Hole Physics, *Phys. Rev. D* **9**, 3292 (1974)

で展開されている．ブラックホールからの放射については

S. W. Hawking, Black Hole Explosions ? *Nature* **248**, 30 (1974)

S. W. Hawking.Particle Creation by Black Holes, *Commun. Math. Phys.* **43**, 199 (1975)

に扱われている．経路積分を用いて，この問題を扱った論文は，

J. B. Hartle and S. W. Hawking, Path-Integral Derivation of Black-HoleRadiance, *Phys. Rev. D* **13**, 2188 (1976)

だが，例のプロパゲータの解析性の証明が与えられている．ブラックホールの熱力学についての一般的背景は，

J. D. Bekenstein, Black Hole Thermodynamics, *Phys. Today*, January 1980, p. 24

を見るとよい．クルスカル座標について，より詳しくは

J. L. Anderson, *Principles of Relativity Physics*, Academic Press, New York, 1967

を参照のこと．

ファインマンの量子化原理と相対論を結びつけようとするのは，究極的には，その原理を重力場自身の量子化に使いたいからである．基本的なアイデアは，古典場の方程式にしたがわないものまで含めて，「すべて」の3次式 - 幾何を許してしまうということである．与えられた3次式 - 幾何に対する確率振幅は，$\exp(iS/\hbar)$ で与えられ，ここで，S はその幾何構造上の関数で，特にその極値は，古典場の方程式を満たすものである．残りの理論は簡単である．つまり，これらの振幅項を足しあわせればよい．しかし，もちろん，計算は簡単ではないし，重力場の量子化特有のむずかしさを実感させられる．この分野の初期の研究として，

C. W. Misner, Feynman Quantization of General Relativity, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 497 (1957)

がある．さらに突っこんだ理論展開は，

J. A.Wheeler, Superspace and the Nature of Quantum Geometrodynamics, in C. M. DeWitt and J.A.Wheeler, Eds. *Battelle Rencontres*, Benjamin, New York, 1968

C. W. Misner, K. S. Throne, and J. A. Wheeler, *Gravitation*, Freeman, San Francisco, 1971

を見よ．もっと最近になって，Hawking はこの方法と解析接続を組みあわせて，場の量子論のユークリッド化の形式を得た．彼は，和を3次式 - 幾何に限定しない．そうすると，和をとるための境界条件を定義することが微妙な問題になる．また，収束の問題もある．なぜなら，解析接続された振幅 $\exp(-S/\hbar)$ には，S に大きな負の値をとらせることになる計量が含まれているからである．停留位相近似をすると古典場が復活し，小さな振動の積分（「1ループ近似」）が，熱的グラビトンを与える．

Hawking は，また，この量子論からブラックホールの熱力学を導いてもいる．これらは全部

S. W. Hawking, The Path-Integral Approach to Quantum Gravity, in S. W. Hawking and W. Israel, Eds., *General Relativity*, Cambridge, London, 1979

にある．また，

G. W. Gibbons, S. W. Hawking, and M. J. Perry, Path Integrals and the Indefiniteness of the Gravitational Action, *Nucl. Phys. B*. **138**, 141 (1978)

も見よ．経路積分の技術的な点から見ると，この方法は，ほかの場の理論の量子化

の場合と同様に，非常にあらっぽい場を「経路」和で考える際の場の欠陥（？）の問題に直面する．30.1節で議論するように，経路和の対象となる場には微分が欠けているだけではなく，それらをブラウン運動の経路と同じ程度に性質のよいものに変えようとする際，（積分によって）なめらかにする可能性が何通りもありうる．しかし，重力に関していえば，この問題は，それほど深刻ではない．長さの次元をもつ作用積分Iを使えば，振幅は$\exp(iI/L_0)$と書かれる．ただし，$L_0=(\hbar G/c^3)^{1/2}$はプランク長である．（Gは重力結合定数）．$L_0 \sim 1.6\times 10^{-33}$cmのオーダーである．一方，場の悪いふるまいは，通常，観測点からずっと離れたスケールの点に起きると考えてよいので，量子論がつくりだす準微小世界の病的な性質は平滑化を受け，10^{-13}cmのような長い距離のオーダーでは問題が出てこないような形になってしまう．

26章　統計力学への応用

汎関数積分の代表的な応用例の1つは，統計力学における分配関数の計算である．この問題だけで，ゆうに本1冊以上が書けるほどである．現に，多様な応用例を扱った単行本1冊程度の総合報告がいくつも書かれている．というわけで，ここでは，包括的な扱いはしないで，ごく基本的なことにだけ留めておく．

すべてとはいえないが，ほとんどの応用で基礎となるのは，統計力学の基本量である分配関数で，

$$Z=\mathrm{Tr}\ \exp(-\beta H) \tag{26-1}$$

である．ここで，βは温度の逆数（$\beta=1/k_BT$, k_Bはボルツマン定数）．一方，経路積分は，

$$G(x,t;y)=\left\langle x\left|\exp\left(\frac{-itH}{\hbar}\right)\right|y\right\rangle \tag{26-2}$$

を計算することに使われる．つまり，時間発展演算子の積分核である．したがって，Gを計算することができるなら，トレースをとり，解析接続すれば，分配関数が得られるということになる．

手始めに，（逆）温度βにある理想気体に関連して，この関係を考えてみよう．粒子がN個あって，その1つ1つがハミルトニアン$H=p^2/2m+V(x)$をもち，粒子間では相互作用しないとする．このときには，

$$\begin{aligned}Z&=\mathrm{Tr}\exp\left(-\beta\sum_{i=1}^{N}H_i\right)=[\mathrm{Tr}\exp(-\beta H)]^N\\&=\left[\mathrm{Tr}\exp\left(\frac{-i(\beta\hbar/i)H}{\hbar}\right)\right]^N=\left[\int dx\,G(x,-i\beta\hbar;x)\right]^N\end{aligned} \tag{26-3}$$

である．Zの古典極限は，

$$G(x,t;y)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\ \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\frac{(x-y)^2}{t}-V(x)t\right)\right] \tag{26-4}$$

と近似すれば，いちばんあらっぽいものが得られる．これは，y から x へ直線を引き，[(1-24)式のように中間状態を挟まないで] その上で古典作用積分を計算することに対応する．(26-3)式にふさわしいように変数変換($t\to-i\beta\hbar$)を行なうと，

$$Z^{1/N}=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}\int\exp(-\beta V)\,dx \tag{26-5}$$

が得られる．これは，古典力学的に厳密な分配関数に，状態の数を計算するための位相空間の単位体積($2\pi\hbar$)がつけ加えられたものになっている．

Z 自体を汎関数積分の形に書いてもよい．(26-3)式から，

$$\zeta\equiv Z^{1/N}=\int dxG(x,-i\beta\hbar;x)$$

$$=\sum_{\text{paths}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^{-i\beta\hbar}dt'\left(\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt'}\right)^2-V(x)\right)\right] \tag{26-6}$$

と直接書く．変数変換 $\tau=it/\hbar$ を行なうと（これは，解析接続とみなすほうがよいかもしれない)，積分は，

$$\zeta=\sum\exp\left[-\int_0^{\beta}dt'\left(\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{dx}{dt'}\right)^2+V(x)\right)\right] \tag{26-7}$$

の形をとる．時間に依存しない V に対しては，この積分は

$$\zeta=E(\exp(-\beta V)) \tag{26-8}$$

とも書くことができる．ただしここでは，9章で導入した，ブラウン運動の経路からなる標本空間の上での平均値をとる記号を使った．(26-7)式で拡散係数に対応するものは $\hbar^2$ になっていることに注意してほしい．したがって，$\hbar\to0$ の極限では，この拡散からくる位置の不確定性は，予想どおり，消えてしまう．

別の変数変換 $\tau=it$ を行なうと，(26-7)式の指数関数の変数の部分がハミルトニアンのように見えるようにすることができる．この形も，ときどき便利なことがある．

量子補正は，ウィグナー - カークウッド(Wigner-Kirkwood)展開から得られる．この展開の第1項は，$G(x,t;x)$ で小さい t を考えれば簡単に得られる．これは，$t\to-i\beta\hbar$ を思いだせば，小さい $\hbar$ か高い温度の場合であることがわかる．$(x,0)$ から (x,t) への古典軌跡は，$x(t')\equiv x$, $0\leqslant t'\leqslant t$ だから，これの補正は，そのまわりのゆらぎを考慮することに対応する．よって，汎関数積分のなかで，$\xi(t')=x(t')-x$ を

積分変数とすると，

$$G(x,t;x)=\sum_{\substack{\xi(0)=0\\ \xi(t)=0}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{d\xi}{dt'}\right)^2-V(x+\xi)\right]\right\} \tag{26-9}$$

となる．xにおけるゆらぎは小さく，すなわち$\xi^2=\mathrm{O}(t)$程度だから，Vをξの2次まで展開する．このとき，ラグランジアンが2次に留まるので，前に示した結果を使うことができる．そこで，

$$V(x+\xi)=V(x)+\xi V'(x)+\frac{1}{2}\xi^2V''(x)+\mathrm{O}(\xi^3)$$

$$=V-\frac{\frac{1}{2}(V')^2}{V''}+\tfrac{1}{2}V''[\xi+V'/V'']^2+\mathrm{O}(\xi^3) \tag{26-10}$$

と書いて，(26-9)式を$m\omega^2/2=V''/2$という調和振動子で近似する．このプロパゲータをG^0としよう．これから，

$$G(x,t;x)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(V-\frac{(V')^2}{2V''}\right)dt'\right]G^0\left(\frac{V'}{V''},t;\frac{V'}{V''}\right) \tag{26-11}$$

と分解される．調和振動子についてはわかっていて（6章参照），結局，

$$G(x,t;x)=\exp\left[-\frac{it}{\hbar}\left(V-\frac{(V')^2}{2V''}\right)\right]\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}}$$

$$\times\exp\left[\frac{im\omega}{\hbar\sin\omega t}\left(\frac{V'}{V''}\right)^2(\cos\omega t-1)\right] \tag{26-12}$$

となる．$|t|$は，もともと小さいと仮定されているので（この段階では，$\sqrt{m/V''}$に比べて小さくなければならないことがわかる），

$$G(x,t;x)=\exp\left[-\frac{it}{\hbar}\left(V-\frac{(V')^2}{2V''}\right)\right]\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\sqrt{\frac{1}{1-\dfrac{\omega^2t^2}{6}}}$$

$$\times\exp\left\{\frac{im\omega^2t^2/2}{\hbar t\left(1-\dfrac{\omega^2t^2}{6}\right)}\left(\frac{V'}{V''}\right)^2\left(-1+\frac{\omega^2t^2}{12}\right)\right\} \tag{26-13}$$

となる．関係$m\omega^2=V''$を代入する，$(V')^2/2V''$がキャンセルする，指数関数でtと

t^3をとっておく，などの処理をするとGは，

$$G(x,t;x)=\left(1+\frac{V''\beta^2\hbar^2}{12m}\right)\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\,\exp\left(-\frac{itV}{\hbar}\right)\exp\left[\frac{-it^3(V')^2}{24\hbar m}\right] \quad (26\text{-}14)$$

となる．ζの計算に戻って，tを$-i\beta\hbar$で置きかえ，t^3を含む指数関数を展開する．そして，xについて積分を実行すればよい．xについての積分では，部分積分を行なうと，V''が$\beta(V')^2$に置きかわる．最終的に，

$$\zeta=\int dx\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}\;e^{-\beta V}\left[1-\frac{\beta^3\hbar^2}{24m}\left(\frac{dV}{dx}\right)^2\right] \quad (26\text{-}15)$$

が得られる．これは，ウィグナー - カークウッド展開のはじめの2項（$\hbar^0$と$\hbar^2$のオーダー）である．

上の定式化の途中では，$V''\neq0$が要求されている．しかし，最終結果にV''は入っていない．実際は，V''がゼロになったとしても，計算はかえって簡単になるだけだ．調和振動子の結果（(6-37)式）ではなく，一様な場のためのプロパゲータ，(6-5)式，を使っておきさえすれば済むことである．

ここまで，理想気体に限定したのは，説明のつごう上そうしただけのことである．われわれが使ったハミルトニアン$p^2/2m+V(x)$で，変数pとxをN次元にすればよい．結果は，ただちに

$$Z=\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{N/2}\int d^Nx\exp(-\beta V(x_1,\ldots,x_N)) \quad (26\text{-}16)$$

となる．Vとして，1体ポテンシャルの和とすれば，前の結果に戻る．

ウィグナー - カークウッド展開のほうも，容易に一般化することができる．$(m/2\pi\beta\hbar^2)^{N/2}$は使わなければならないが，それを別にすれば，$dx$と$(\partial V/\partial x)^2$を多次元用に解釈し直すだけでよい．

ノート

経路積分の統計力学への応用に関して，包括的な文献リストをつくれといわれても無理である．単行本をあげておくと，

R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965

R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, Reading, Mass., 1972

M. Kac, *Probability and Related Topics in Physical Sciences*, Interscience,

New York, 1959

また，総説のほうは，

S. G. Brush, Functional Integrals and Statisitical Physics, *Rev. Mod. Phys.***33**, 79 (1961)

S. K. Ma, Introduction to the Renormalization Group, *Rev. Mod. Phys*. **45**, 589 (1973)

F. W. Wiegel,Path Integral Methods in Statistical Mechanics, *Phys. Rep*. (*Phys. Lett. C*) **16**, 57 (1975)

等がある．

27章　経路積分のコヒーレント状態表示

場の理論では，自由場は振動子の集合として記述できることが多い．しかし，ここでの振動子の「座標」とか「運動量」は，物理的に重要ではない．より興味深いのは，生成・消滅演算子で，これらに関係した汎関数積分が場の理論では有用である．

普通の経路積分は，$\exp(-iHt)$ を$[\exp(-iHt/N)]^N$の形に書き，それらの積の間に，単位（演算子としての1）の分解の座標表示を挿入すれば得られる．同様にして，位相空間経路積分（29章）は，$1=\int dq|q\rangle\langle q|$ と $1=\int dp|p\rangle\langle p|$ を，時刻をずらして，挟むことにより得られる．消滅演算子の固有関数を使うと，もう1つ経路積分が生まれる．ただ，あとで見るように，これはある意味で位相空間経路積分と同じものでもある．これらの固有関数はコヒーレント状態とよばれ，特に多体問題や場の経路積分に適している．

この形の汎関数積分を行なうための数学的手続きは，1次元系を量子化する問題，つまり量子力学の一番いちばん簡単な場合において，その基本的な部分が出てきてしまう．したがって，これを先に詳しく調べておこうと思う．

粒子の位置と運動量を，それぞれ，x と p とする．ハミルトニアンはH．便宜上

$$H_0=\frac{p^2}{2}+\frac{x^2}{2} \tag{27-1}$$

を定義しておくが，これは，Hと同じ場合も，そうでない場合もある．あとで，振動数εを導入するが，いまのところ，理論を簡単な形に留めておこう．

消滅演算子（あるいは降下演算子）は

$$a=\frac{x+ip}{\sqrt{2}} \tag{27-2}$$

で定義される．それと共役の生成演算子（昇位演算子）は，

$$a^\dagger=\frac{x-ip}{\sqrt{2}} \tag{27-3}$$

である．$[x,p]=i$ に由来して，

$$\left[a, a^{\dagger}\right]=1 \tag{27-4}$$

を満たす．これらには，よく知られた結果がたくさんある．ここでそのいくつか並べておく．

$$N=a^{\dagger}a=\text{（個数演算子）}=H_0-\tfrac{1}{2}$$

$$|n\rangle=\text{（}N\text{の規格化された固有状態）}=(n!)^{-1/2}(a^{\dagger})^n|0\rangle$$

$$N|n\rangle=n|n\rangle \qquad n=0,1,2,\cdots$$

$$\langle x|n\rangle=(\pi^{1/2}2^n n!)^{-1/2}H_n(x)e^{-x^2/2}$$

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n e^{-x^2}=(\,n\text{次のエルミート多項式})$$

$$e^{-y^2+2xy}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)y^n}{n!} \qquad \text{母関数}$$

$$a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad a^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{27-5}$$

コヒーレント状態は，非エルーミト演算子aの固有関数である．これらの状態が

$$|z\rangle=N(z)\exp(za^{\dagger})|0\rangle \tag{27-6}$$

の形をもつことは，簡単に示される．ただし，zは複素数，$N(z)$は規格化定数，$|0\rangle$は真空状態，または基底状態で，(27-5)式の記号の使い方にしたがって書かれている．aの性質によって，

$$a|z\rangle=N(z)a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{n!}(a^{\dagger})^n|0\rangle=N(z)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}a|n\rangle$$
$$=N(z)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{(n-1)!}}|n-1\rangle=z|z\rangle \tag{27-7}$$

が示される．$|z\rangle$に随伴した状態$\langle z|$は，$N(z)^*\langle 0|\exp(z^*a)$と書かれる．2つの状態の内積は

$$\langle z'|z\rangle=N(z')^*N(z)\langle 0|\exp(z'^*a)\exp(za^{\dagger})|0\rangle \tag{27-8}$$

である．この指数関数を，(27-7)式のように，展開しておきたいが，ここでは，恒等式

$$e^{A+B}=e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}=e^B e^A e^{-\frac{1}{2}[B,A]} \tag{27-9}$$

を使うのが便利である．この式は，$[A, B]$がAとBのどちらとも交換すれば，常に

なりたつ．これを使って(27-8)式の演算子の順序を交換すると，$\exp(z'^*z)$ という因子が出てくる．一方，$\exp(z'^*a)$ を $|0\rangle$ に施しても，単に $|0\rangle$ になるだけだ．同じことが，$\langle 0|\exp(za^\dagger)$ にもいえる．したがって，

$$\langle z'|z\rangle = N(z')^*N(z)\exp(z'^*z) \tag{27-10}$$

となる．これから，規格化因子として $N(z)=\exp(-|z|^2/2)$ をとればよいことがわかるから，最終的に

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}+za^\dagger\right)|0\rangle, \qquad \langle z'|z\rangle = \exp\left(z'^*z-\tfrac{1}{2}(|z|^2+|z'|^2)\right) \tag{27-11}$$

となる．コヒーレント状態は，最小不確定性波束でもあり，その H_0 による時間発展は自明である．コヒーレント状態の性質を並べておく：

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty} z^n(n!)^{-1/2}|n\rangle$$

$$\langle z|x|z\rangle = \sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,z, \qquad \langle z|p|z\rangle = \sqrt{2}\,\mathrm{Im}\,z$$

$$\exp(-iH_0t)|z\rangle = \exp\left(-\frac{it}{2}\right)|z\exp(-it)\rangle$$

$$\langle w|\exp(-iH_0t)|z\rangle = \exp\left[-\frac{it}{2}+w^*ze^{-it}-\frac{(|w|^2+|z|^2)}{2}\right], \qquad z,w\in\mathbf{C}$$

$$\langle x|z\rangle = \pi^{-1/4}\exp\left[-\frac{|z|^2}{2}-\tfrac{1}{2}(x^2+z^2)+\sqrt{2}\,xz\right] \tag{27-12}$$

この最後の行は，コヒーレント状態の座標表示であるが，本質的に，エルミート多項式の母関数である．また，最小不確定性波束 $\langle x|z\rangle$ が，振動数 $\omega=1$ をもった調和振動子のポテンシャル上に置かれた場合には，時間とともにこの波束がまったく広がっていかないこともわかる．

われわれの目的にとって重要な公式は，単位（演算子としての I）の分解である．この分解は，集合 $\{|z\rangle | z\in\mathbf{C}\}$ が，完全系を張るのに必要な関数より多くの関数を含んでいる（オーバーコンプリート）ので，一意的に決まらない．非エルミート演算子 a が，ヒルベルト空間の基底系を張るのに，必要以上に固有関数を生みだすことは驚くことではない（実際，$K=\{|n+im\rangle | n,m=$ 整数$\}$ を定義すると，完全系は，K からどの 1 個（きっちり 1 個だけ）の状態でもよいからとり除くと得られる．ここから，特異な，それでいて，美しい数学の問題にいきつく．ノートを見よ）．特に分解の便利な形は，

$$\mathbf{1} = \int \frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\langle z| \tag{27-13}$$

である．ここで，d^2z は複素平面上での積分を表わし，$d^2z=d(\mathrm{Re}\ z)d(\mathrm{Im}\ z)$ の意味である．(27-13) 式は，$|z\rangle$ を調和振動子の固有関数で展開し，

$$\int d^2z e^{-|z|^2} z^{*n} z^m = \pi n! \delta_{nm} \tag{27-14}$$

を使うと証明することができる．

演習：　オーバーコンプリートについて，上で述べたことを，

$$\int d^2z\, v(z)|z\rangle = 0$$

を満たす関数 $v(z)$ を見いだすことによって，確認せよ．上のかっこのなかで述べたことから，

$$|0\rangle = \sum_{\substack{n,m \\ \text{but not } n=m=0}} |n+im\rangle v_{nm}$$

となるような係数 v_{nm} が見つかるはずである．これらの関数および係数を見いだせ．

ここで，Bargmann が発展させた解析関数のヒルベルト空間論がおもしろいから，寄り道できたらと思う．しかし，この誘惑には負けないことにする．しかし，1つだけつぎの結果を手短に注意しておきたい．

もともとのヒルベルト空間 $L^2(\mathsf{R})$ から出発して，各関数 $|\psi\rangle \in L^2(\mathsf{R})$ に，複素関数

$$f(z) = e^{|z|^2/2} \langle z^* | \psi \rangle \tag{27-15}$$

を対応させることができる．$\langle z^*|$ を調和振動子の固有関数で展開してみれば，f は，いたるところ，収束級数をもつことが明らかである．したがって，解析的というだけでなく，整関数にもなっている．同じようにして $|\varphi\rangle$ を使って $g(z)$ を定義し，これと $f(z)$ の間の積分

$$\frac{1}{\pi} \int d^2z e^{-|z|^2} f^*(z) g(z) \tag{27-16}$$

をつくると，これは内積 $\langle \psi | \varphi \rangle$ に等しい．このことは，(27-13) 式（ただし z を z^* で置きかえて）から直接導かれる．

さてここで，立場をひっくり返して，1および多変数の整関数からなるベクトル空間を考える．(27-16) 式（あるいは，その多次元への拡張）を内積と解釈すると，ノルムが有限の整関数からなるヒルベルト空間（$\mathscr{F}_n$，n は複素変数の数）ができる．

すると，(27-15) 式は，$L^2(\mathrm{R})$ と $\mathscr{F}_1$（あるいは，$L^2(\mathrm{R}^n)$ と $\mathscr{F}_n$）を関係づけるユニタリー変換と解釈できる．$\mathscr{F}_1$ の上では，演算子 $a^\dagger$ は，z のかけ算で表現される．したがって，$\mathscr{F}_1$ 上の a は，まさに d/dz ということもほとんど明らかである．

この考え方を応用して，$SU(2)$ の表現を構成することができる．$U\in SU(2)$ の行列は，行列式 1 をもち，C^2 に作用するユニタリー行列である．これは，ヒルベルト空間 $\mathscr{F}_2$ の上で，通常の変換

$$(A_U f)(\zeta)=f(U^T\zeta), \qquad \zeta=\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}\in \mathrm{C}^2 \tag{27-17}$$

を引き起こす．ここで，T は，転置を表わす．$\{A_U\}$ は，明らかに，$SU(2)$ のユニタリー表現である．A_U は，$\mathscr{F}_2$ のなかで z_1 と z_2 について斉次の多項式からなる部分空間を不変に保つということに注意すれば，この変換のメリットが理解できる．こうして，それぞれの部分空間

$$\begin{aligned} Q_j &= \left\{ f(\zeta)=\sum a_{nm} z_1^n z_2^m \,\middle|\, n+m=2j, n\geqslant 0, m\geqslant 0, \zeta=\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \left\{ f\in\mathscr{F}_2 \,|\, f(\lambda\zeta)=\lambda^{2j} f(\zeta) \right\} \\ j&=0, \tfrac{1}{2}, 1, \ldots \end{aligned} \tag{27-18}$$

は，$\{A_U\}$ の下で不変に保たれる．したがって，$SU(2)$ の有限次元（$2j+1$ 次元）の表現が与えられる．$\{A_U\}$ の無限小生成演算子も簡単に得られる．すなわち，

$$M_1+iM_2=z_1\frac{d}{dz_2} \qquad M_1-iM_2=z_2\frac{d}{dz_1}$$

$$M_3=\frac{1}{2}\left(z_1\frac{d}{dz_1}-z_2\frac{d}{dz_2} \right) \tag{27-19}$$

である．これらは，$\mathbf{M}\times\mathbf{M}=i\mathbf{M}$ を満たす．第 4 番目の演算子は，

$$N=\frac{1}{2}\left(z_1\frac{d}{dz_1}+z_2\frac{d}{dz_2} \right) \text{ したがって } M^2=M_1^2+M_2^2+M_3^2=N(N+1) \tag{27-20}$$

と選んでおくのが便利である．

(27-17) 式の変換を空間 Q_j に施すと，$SU(2)$ の表現がすぐさま求まる．これで，いわゆる「“D”」行列の表現が，便利につくられるだけでなく，$3j$ シンボルや $6j$ シンボルを計算するうえでも，よい出発点になる．空間 Q_j 上でとられた表現が既約であることは，Schur の補題を行列 M_i（ただしこれは，Q_j に限定されている）に応用すれば証明できる．しかし，この定式化が，完全性の，すなわち，このほかに

$SU(2)$ の表現が存在しないということの，証明の早道を与えるとは考えられない．

もし，生成演算子 M_i が，a_k および $a_k^\dagger$（z_1 と z_2 に対応して $k=1,2$）で書かれるなら，場の理論のボソン生成・消滅演算子が $SU(2)$ の自然な表現を与えることになる．逆に，3次元空間の物理的な回転とは無関係なところでも，場の理論の対称性の群として $SU(2)$ が頻繁に現われる背景に，これがある程度ひそんでいる．こうして，アイソスピンや擬スピンの演算子は，$SU(2)$ の表現を与える．しかし，$SU(2)$ が現われること自体は，ここで示した理由よりもはるかに一般的であると考えられる．というのは，この群は，フェルミオンの場の演算子にも登場するからである．

コヒーレント状態表示の経路積分は，つぎの2つの形式のどちらをとるかで，「簡単」になるか，あるいは「非常に簡単」になるか，いずれかに分かれる．1番目は，非常に簡単なほうで，（調和振動子に対して）有限時間のプロパゲータ

$$
\begin{aligned}
G(z_f, t; z_i) &= \langle z_f | e^{-iH_0 t} | z_i \rangle = e^{-it/2} \langle z_f | z_i e^{-it} \rangle \\
&= \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left(|z_f|^2 + |z_i|^2\right) + z_f^* z_i e^{-it} - \frac{it}{2} \right]
\end{aligned}
\qquad (27\text{-}21)
$$

を計算すれば得られる．ガウス積分を実行するにあたって，$G(z_f, t; z_i)$ や，(27-12) 式の $\langle x|z\rangle$ を使えば，前のほうの章ですでに計算したことのある，調和振動子のプロパゲータが再び導かれる．

2番目の形式は，もう少し経路積分らしく見えるもので，これも役に立つ．$\varepsilon = t/(n+1)$ とし，z_f と z_i の状態の間に，単位の分解を n 回挿入する．H を調和振動子のハミルトニアンと仮定しないで，

$$
G(z_f, t; z_i) = \pi^{-n} \int d^2 z_1 \ldots d^2 z_n \prod_{j=1}^{n+1} \langle z_j | e^{-iH\varepsilon} | z_{j-1} \rangle \qquad (27\text{-}22)
$$

と書く．ただし，$z_{n+1} = z_f$, $z_0 = z_i$．一般的に，ハミルトニアンは

$$
H(\alpha^*, \beta) = \frac{\langle \alpha | H | \beta \rangle}{\langle \alpha | \beta \rangle}, \qquad |\alpha\rangle, |\beta\rangle \text{ コヒーレント状態} \qquad (27\text{-}23)
$$

と書かれるから，(27-22) 式に代入すると，

$$
G = \pi^{-n} \int \left(\prod_{i=1}^{n} d^2 z_i \right) \prod_{j=1}^{n+1} \langle z_j | z_{j-1} \rangle \left[1 - i\varepsilon H(z_j^*, z_{j-1}) + O(\varepsilon^2) \right] \qquad (27\text{-}24)
$$

となる．内積 $\langle \alpha | \beta \rangle$ は，一方，

$$
\begin{aligned}
\langle \alpha | \beta \rangle &= \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right) + \alpha^* \beta \right] \\
&= \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left[\alpha^*(\alpha - \beta) - (\alpha^* - \beta^*)\beta \right] \right]
\end{aligned}
\qquad (27\text{-}25)
$$

である．ε で割ったり掛けたりし，また，

$$\frac{z_j - z_{j-1}}{\varepsilon} = \frac{dz_j}{dt} \tag{27-26}$$

と定義すると，

$$G = \pi^{-n} \int \prod_{i=1}^{n} d^2 z_i \exp\left\{ i\varepsilon \sum_{j=1}^{n+1} \left[\frac{-1}{2i}\left(z_j^* \frac{dz_j}{dt} - \frac{dz_j^*}{dt} z_{j-1} \right) - H(z_j^*, z_{j-1}) \right] + \sum_{j=1}^{n+1} \mathrm{O}(\varepsilon^2) \right\} \tag{27-27}$$

と得られる．$\mathrm{O}(\varepsilon^2)$ の項を無視するのは，いまや標準的な手続きになってしまっている．また，z_{j-1} を z_j で置きかえる．これが正しいか検証するのはあとまわしにするが，この置きかえから，誤差 $\mathrm{O}(\varepsilon(z_j - z_{j-1}))$ が生みだされる．これらの誤差を無視してしまうと，$z(0)=z_i$, $z(t)=z_f$ に対して，複素数値関数 $z(\tau)$ の上で，G の経路積分表示が得られる．それは，

$$G(z_f, t; z_i) = \lim_{n\to\infty} \pi^{-n} \int d^2 z_1 \ldots d^2 z_n \times \exp\left\{ i\int_0^t d\tau \left[\frac{i}{2}\left(z^* \frac{dz}{d\tau} - \frac{dz^*}{d\tau} z \right) - H(z^*, z) \right] \right\} \tag{27-28}$$

である．この式で，微分と積分は，和の極限をとると解釈する．

私の知るかぎり，$\varepsilon(z_j - z_{j-1})$ の項が無視できるか，まじめに研究された例はない．私自身は，この項は，量子力学における演算子の順序づけの問題に関連していると想像している．(27-28) 式と (27-23) 式は，どんなハミルトニアンに対しても，プロパゲータを一意的に与えているように見える．しかしそれは，正しくはありえない．というのは，多くの研究者が，試みてはがっかりさせられてきたように，経路積分は，演算子の順序づけに関するあいまいさの問題を，解決していないからである．$\varepsilon(z_j - z_{j-1})$ が消えない理由は，経路の和に効いてくる曲線 $z(\tau)$ が，通常の経路積分に入ってくるブラウン運動的な経路 $x(\tau)$ ($x(\tau)$ は連続で，いたるところ微分不可能，しかし，$(\Delta x)^2 \sim \Delta t$) よりも，特異性が強いからである．$z(\tau)$ の質が悪いことを見る方法は，2通りある．1つは，状態 $|z\rangle$ と $|z'\rangle$ ($z \neq z'$) が有限の重なりをもち，

$$\langle z' | \exp(-iHt) | z \rangle$$

が $t \to 0$ でも消えないが，対照的に

$$\langle x' | \exp(-iHt) | x \rangle$$

のほうは（$|x\rangle$ は，位置の固有関数），この極限でデルタ関数になる．もう1つは，位相空間経路積分の類推で見ることである．ある意味では，d^2z は $dp\,dx$ のようにふるまう（$a=(x+ip)/\sqrt{2}$ を思いだすこと）．一方，(27-28)式の積分は，$(1/2)(p\,dx-x\,dp)-H\,dt$ に似ている．位相空間経路積分の特徴は（29章を見よ），位相空間での経路が不連続なので，$\varepsilon\Delta p$ が ε よりも速くゼロになる必要がないということである．

いま見たように，むずかしい点があることはあるが，経路積分(27-28)式の性質を調べていくことにする．まず，指数関数の肩の関数を，作用積分とみなし，そこから，どんな古典力学がでてくるかをみよう．もし，z と z^* が独立変数として扱われるとすると，複素数の運動方程式が得られる．もっとなじみの形は，

$$z=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+i\pi) \tag{27-29}$$

と置いて，実数 ξ と π に入れかえれば得られる．すると，作用積分は，

$$S=\int d\tau\left\{\frac{1}{2}\left[\pi\frac{d\xi}{d\tau}-\xi\frac{d\pi}{d\tau}\right]-h(\pi,\xi)\right\} \tag{27-30}$$

となる．ただし，$h(\pi,\xi)=H[(\xi-i\pi)/\sqrt{2},(\xi+i\pi)/\sqrt{2}\,]$．$\xi$ と π に関して，変分すると普通の正準方程式が出てくる．複素数の運動方程式の例として，$H_0=a^\dagger a+1/2$ の場合を考えてみよう．古典運動方程式は，

$$i\frac{dz}{dt}=\frac{\partial H_0}{\partial z^*}=\frac{\partial}{\partial z^*}\left[\frac{\langle z|H_0|z\rangle}{\langle z|z\rangle}\right]=z$$

$$-i\frac{dz}{dt}=z^* \tag{27-31}$$

となり，解に

$$z(t)=z(0)e^{-it}\qquad z^*(t)=z^*(0)e^{it} \tag{27-32}$$

をもつ．

経路積分(27-28)式は，主に，場の理論とボソンの統計力学（超流動状態のヘリウムが理解できるかもしれないという希望をもって）に応用された．場の理論や統計力学に一般化することは，現われる数学的な問題がむずかしいとしても，形式的には自明である．

ボソン場が k でラベルされる1粒子状態をもち，その結果，生成・消滅演算子 $a_k^\dagger$ と a_k を構成できるものとする．これらは，普通のボソン型交換関係

$$\left[a_k,a_{k'}^\dagger\right]=\delta_{kk'},\quad 等 \tag{27-33}$$

を満たす（$\delta_{kk''}$は，クロネッカーのデルタ関数でもディラックのでもよい）．もし，それぞれのモードが結合していなければ（自由ボソン），ハミルトニアンは，

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k \tag{27-34}$$

である．ここで，ε_kは，k番目の振動数にあたるエネルギー．2体相互作用は，

$$V = \lambda \sum_{k, k', q} v(q) a_{k+q}^\dagger a_{k'-q}^\dagger a_{k'} a_k \tag{27-35}$$

の形にとることができる．$H = H_0 + V$とする．化学ポテンシャルμをもつ大正準分配関数は（$N = \sum a_k^\dagger a_k$として）

$$Z = \mathrm{Tr}\ \exp(-\beta(H - \mu N)) \tag{27-36}$$

である．このトレースをとるための完全系は，$\{|n_{k_1}, n_{k2}, \ldots\rangle | k$は，1粒子状態$n_k = 0, 1, \ldots$をわたる$\}$．この集合のかわりに，各$k$について，コヒーレント状態をとることができる．特定のkで指定される部分空間に作用する演算子Aを考える．（αは，コヒーレント状態を表わすものとして），そのトレースは，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\, A &= \sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_n \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|A|n\rangle \\ &= \int \frac{d^2\alpha}{\pi} \langle\alpha|A|\alpha\rangle \end{aligned} \tag{27-37}$$

である．明らかに，(27-36)式のトレースは，状態　$\{|z_{k_1}, z_{k2}, \ldots\rangle = |z_{k_1}\rangle|z_{k2}\rangle \ldots |z_{kN}\rangle | z_{k_i} \in \mathbf{C}$, kは1粒子状態を走る$\}$　の上でのトレースに置きかわった．分配関数とグリーン関数の関係は，

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(H - \mu N)} = \mathrm{Tr}\, G(-i\beta) \tag{27-38}$$

である．

もし，$\lambda = 0\ (V = 0)$ならば，モードは互いに結合しておらず，グリーン関数は単に個々のモードの積である．1つのモードの場合に対する以前の結果から，場の理論のグリーン関数は，

$$G(\{z_{fk}\},t;\{z_{ik}\})$$
$$=\langle z_{fk_1}\ldots|\exp[-it(H_0-\mu N)]|z_{ik_1}\ldots\rangle$$
$$=\int\left(\prod_k d^2z_k(\tau)\right)\exp\left\{i\int_0^t d\tau\sum_k\left[\frac{1}{2}i\left(z_k^*\frac{dz_k}{d\tau}-\frac{dz_k^*}{d\tau}z_k\right)-(\varepsilon_k-\mu)z_k^*z_k\right]\right\}$$
(27-39)

となることが示せる．ここで，記号$d^2z_k(\tau)$は，極限操作

$$\lim_{n\to\infty}\pi^{-n}d^2z_{k1}\ldots d^2z_{kn} \tag{27-40}$$

で実質的に得られる測度の意味である．τの上での積分で，変数変換$s=i\tau$を行なう．新しい変数の（Zを計算する際の）上限が，ちょうどβである．分配関数は，こうして，

$$Z=\int\prod_k\frac{d^2z_k}{\pi}\int\prod_k d^2z_k(s)\exp\left\{-\int_0^\beta ds\sum_k\left[\frac{1}{2}\left(z_k^*(s)\frac{dz_k(s)}{ds}-\frac{dz_k^*(s)}{ds}z_k(s)\right)+(\varepsilon_k-\mu)z_k^*(s)z_k(s)\right]\right\}$$
(27-41)

となる．(27-41)式の経路$z_k(s)$は，$s=0$のz_kで始まり，βのz_kで終わる．(27-41)式は簡単に積分でき，[(27-21)式に注意]，理想的なボソン気体の分配関数が得られる．

演習：　これを実際に計算してみよ．k番目のモードの個数演算子の期待値はなにか．

ポテンシャルVの(27-35)式を使って，物理現象を説明してみたいと思う人もいるだろう．「非常に簡単」型のものではなく，「簡単」型の演算子(27-28)式にこだわると，きれいな形式的表現が得られる．分配関数を計算するためには，前と同じ基底関数系を使って，トレースを実行すればよい（今度は，Zは，因数分解できない）．結果は，

$$Z=\int\prod_k\frac{d^2z_k}{\pi}\left(\prod_k\langle z_k|\right)\exp\{-\beta[(H_0-\mu N)+V]\}\left(\prod_k|z_k\rangle\right) \tag{27-42}$$

である．ここでも，単位の分解を挟んでやり，ついで，つぎの項

$$\left(\prod_k\langle z_{kj}|\right)\left\{\sum_l(\varepsilon_l-\mu)a_l^\dagger a_l+\lambda\sum_{k,k',q}v(q)a_{k+q}^\dagger a_{k'-q}^\dagger a_{k'}a_k\right\}\left(\prod_{k'}|z_{k'j-1}\rangle\right)$$
(27-43)

を調べることになる．1体相互作用の場合と同様に，a_k（右側に掛かる）はz_{kj-1}になり，$a_k^\dagger$（これは左側に現われる）はz_{kj}^*になる．したがって，被積分関数に現われるハミルトニアンは，多数のz_kの関数になっており，対角形にならない．この（深刻な）複雑さを別にすれば，すべて以前のようにことが運び，Zは

$$Z=\int\prod_k\frac{d^2z_k}{\pi}\int\prod_k d^2z_k(s)\exp\left\{-\int_0^\beta ds\left[\sum_k\left[\frac{1}{2}\left(z_k^*(s)\frac{dz_k(s)}{ds}-\frac{dz_k^*(s)}{ds}z_k(s)\right)+(\varepsilon_k-\mu)z_k^*(s)z_k(s)\right]+\lambda\sum_{k,k',q}v(q)z_{k+q}^*(s)z_{k'-q}^*(s)z_{k'}(s)z_k(s)\right]\right\} \tag{27-44}$$

と得られる．

もしkが運動量変数であって，$\varepsilon_k=k^2/2$ならば，上の式はより簡単な形になる．$\mathrm{Re}z_k$と$\mathrm{Im}z_k$を，それぞれ，$\mathrm{Re}\psi(\mathbf{r})$と$\mathrm{Im}\psi(\mathbf{r})$のフーリエ係数ととると（これで変数$z$から$s$依存性を受け継ぐことになる）

$$Z=\int\prod_{\mathbf{r}}d\psi(\mathbf{r},s)\exp\left\{-\int_0^\beta ds\int d^3r\left[\frac{1}{2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial s}-\frac{\partial\psi^*}{\partial s}\psi\right)-\psi^*\left(\frac{1}{2}\nabla^2+\mu\right)\psi+\frac{1}{2}\lambda\int d^3r'\psi^*(\mathbf{r},s)\psi^*(\mathbf{r}',s)v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',s)\psi(\mathbf{r},s)\right]\right\} \tag{27-45}$$

と書きかえられる．

このZの形は，クラスター展開法における，つながったグラフだけによる展開の出発点となり，魅力的である．本書では，これについては立ちいらない．興味があれば，章末に挙げておいたCasher, Lurie, Revzenの論文を参照されたい．

(27-45)式が本当にインパクトをおよぼす部分というのは，残念ながら，数学的にはしっかりしていない．汎関数積分が，ラプラス法を使って近似できると仮定してみよう．つまり，積分の主要な値は，(27-45)式の指数関数の肩の部分を最小化するψからくると仮定するのである（この仮定は，実は，はっきりいって正しくない）．いま，

$$\Lambda(\psi^*,\psi)=-\psi^*(\mathbf{r},s)\left(\frac{1}{2}\nabla^2+\mu\right)\psi(\mathbf{r},s)$$
$$+\frac{1}{2}\lambda\int d^3r'\psi^*(\mathbf{r},s)\psi^*(\mathbf{r}',s)v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',s)\psi(\mathbf{r},s) \quad (27\text{-}46)$$

としておく．すると，変分によって

$$\frac{\partial\psi}{\partial s}=-\frac{\partial\Lambda}{\partial\psi^*},\qquad \frac{\partial\psi^*}{\partial s}=-\frac{\partial\Lambda}{\partial\psi} \quad (27\text{-}47)$$

が得られる．

関数 $z_k(s)$ が始まる点と終わる点は同じなので，ψ もこの性質をもっている．したがって，もし

$$\frac{\partial\Lambda}{\partial\psi}=0 \quad (27\text{-}48)$$

となる $\partial\psi/\partial s=0$ が存在するなら，それは最小値を与える．$\partial\psi/\partial s=0$ が境界条件と合っているからだ．

超流動のランダウ - ギンズブルグ(Landau-Ginzburg) 方程式を勉強したことのある人なら，上のいくつかの式に，旧友に会ったような気がするだろう．ランダウ - ギンズブルグ理論では，超流動成分の波動関数は，複素の秩序パラメータになっており，(27-48) 式の形の式を［ダイナミックスの問題の場合には，(27-47) 式を］厳格に満たす．このとき，“ハミルトニアン”は，(27-46) 式に非常によく似た形をしている（普通，$v(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ はデルタ関数ととられることが多い）．

こうしてわれわれは，ランダウ - ギンズブルグ理論を導いて，その秩序パラメータがコヒーレント状態の波動関数であることを示した．超流動の研究における基本的な数学的問題は，2流体の現象論を微視的なダイナミックスと関係づけることである．一般的な教えにのっとれば，超流体の密度は複素秩序パラメータの2乗の大きさで，その秩序パラメータがランダウ - ギンズブルグ方程式を満たすのである．もし，途中にうるさい数学的問題がなければ，この章で示した理論は，ランダウ - ギンズブルグ方程式をほぼ正当化することになり，巨視的－微視的理論の関係を明らかにしたことにもなっていたはずなのだ．

ラプラスの方法を使ったことが，われわれの弱点である（物理学の文献では，ラプラス法，最急降下法（鞍部点法），停留位相近似といった言葉が，しばしば混用される）．汎関数積分に対するこの簡単な近似は，平均場理論－ランダウ - ギンズブル

グ理論－を与えた．実際，これは，ラプラスの方法と平均場近似が同じ近似になるという，くり返し現われる現象の一例になっている．ラプラス法を使うことのどこがまずいかというと，(27-48) 式の微分方程式で決まる最小値の近傍には，他にも多数，最小値（極小値）が存在するということがある．それぞれの最小値は，系の1つのモードと解釈できる．漸近近似に使う大きいパラメータは，ここでは体積 V である．不幸なことに，$V\to\infty$ のときに，他の最小値は，いちばん深い最小値のまわりに群がってくる（しかも，$V\to\infty$ では，その間隔はゼロに行く）ので，1個だけの最小値でもって積分を近似することは，決してできない．しかも，多数のモードが再び結合して，積分が15章や16章で扱った縮重停留点の場合の無限縮重版になる可能性がある．この問題は，別の箇所でもとりあげる．

しかし，私としては，読者をもやもやした状態のままにして前に進みたくない．平均場近似は，物理の広い領域に適用できる有効な近似であると，はっきりいっておきたい．平均場近似を汎関数積分から組み立て直すことは，統計力学にとって，小さくとも確実な進歩といってよい．

コヒーレント状態を基底系にとった汎関数積分を使うと，量子統計がどうやって分配関数に入るかよくわかる．1変数 z の場合に返り，(27-28) 式で変数変換 $s=\tau/t$ を行なう．すると，

$$
\begin{aligned}
&G(z'',t;z')\\
&=\int_{z(0)=z'}^{z(1)=z''} d^2z(s)\exp\left\{\int_0^1 ds\left[\frac{1}{2}\left(z\frac{dz^*}{ds}-z^*\frac{dz}{ds}\right)-itH(z^*(s),z(s))\right]\right\}\\
&=\langle z''|\exp(-itH)|z'\rangle \qquad (27\text{-}49)
\end{aligned}
$$

と書くことができる．まず，$t=0$ でも，汎関数積分は残るものの，それは，つぶれて1になる．それは，G が，$\langle z''|z'\rangle$ にならなければならないから．$\exp(-iHt)$ よりもう少し一般的な量の期待値は，単位の分解を挿入すれば得られる．たとえば，

$$
\begin{aligned}
&\langle z''|a\exp(-iHt)a^\dagger|z'\rangle\\
&\qquad=\int d^2z(s)\left\{\exp\int_0^1 ds\left[\frac{1}{2}\left(z\frac{dz^*}{ds}-z^*\frac{dz}{ds}\right)-itH\right]\right\}z(s_1)z^*(s_2) \qquad (27\text{-}50)
\end{aligned}
$$

ただし，$1>s_1>s_2>0$（s_1 と s_2 は，それ以外は任意），H の中の z の変数は，s_1 と s_2 の間にあるとする．$t=0$ とすると，

$$\langle z''|aa^\dagger|z'\rangle = \int d^2z(s)\, z(s_1) z^*(s_2) \exp\left(\int_0^1 \frac{1}{2}\left(z\frac{dz^*}{ds} - z^*\frac{dz}{ds}\right)ds\right) \tag{27-51}$$

となる．この式と，$a^\dagger a$ に対して同じようにつくった式をあわせれば，a と $a^\dagger$ の交換関係が得られる．細かいこと抜きで注意だけしておこう．(27-51)式のなかの積分のほとんどはつぶれてしまうから，単位の分解は1個使うだけで十分である．$a^\dagger a$ と $aa^\dagger$ の表式は，

$$\langle z''|a^\dagger a|z'\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi}\langle z''|z\rangle z''^* z'\langle z|z'\rangle \tag{27-52}$$

$$\langle z''|aa^\dagger|z'\rangle = \int \frac{d^2z}{\pi}\langle z''|z\rangle |z|^2\langle z|z'\rangle \tag{27-53}$$

である．(27-52)式で，z''^*z' は因数分解されて，積分の外に出る．(27-53)式では，$|z|^2$ を積分のなかに入れたまま計算しなければならない．恒等式

$$\int \frac{d^2\eta}{\pi}|\eta|^2 \exp(-|\eta|^2 + \xi^*\eta + \eta^*\zeta) = (1+\xi^*\zeta)\exp(\xi^*\zeta) \tag{27-54}$$

（ξ, η, ζは，複素数）を使うと，z''^*z' を別にすれば，(27-53)式には，1，つまり $\langle z''|1|z'\rangle$ がつく．(27-53)式と(27-52)式の差がちょうど交換関係である．ついでに，より簡単な恒等式

$$\int \frac{d^2\eta}{\pi}\exp(-|\eta|^2 + \xi^*\eta + \eta^*\zeta) = \exp(\xi^*\zeta) \tag{27-55}$$

も書いておく．(27-52)式はこれ使う．

ここまでで，

$$z^*\frac{dz}{ds} - z\frac{dz^*}{ds}$$

の項がどんな役割を果たすか，一貫した描像が得られた．与えられたハミルトニアン $H(p, q)$ に対して，古典的な分配関数は

$$Z_{\text{classical}} = \int dp\, dx\, e^{-\beta H} \tag{27-56}$$

である．量子論の分配関数を得るには，d^2z で積分する．これは，前に注意したように，$dp\, dx$ に強く関係している．こうして，

$$Z_{\text{quantum}} = \int \frac{1}{\pi} d^2z \exp\left\{-\int_0^1 ds\left[\frac{1}{2}\left(z^*\frac{dz}{ds} - z\frac{dz^*}{ds}\right) + \beta H\right]\right\} \tag{27-57}$$

が出る．zのs依存性を通して，重み$\exp[-(1/2)\int_0^1 ds(z^* dz/ds - z dz^* ds)]$が，ボソンの古典表式を量子論のそれに変えようとする．

同様にして，フェルミオンを扱う方法があるだろうか．フェルミ統計に役立つかもしれないヒントがあることはある．また，Klauderが発展させた方法で，ボソンとフェルミオンを平行に扱うコヒーレント状態経路積分というのがある（ノート参照）．ある種の「手に負えない履歴」(Klauderの用語による）をどうやって足しあわせるかという問題を考える際に，あいまいさが生ずるのだが，フェルミ統計は，それを処理するなかで入ってくる，というのがKlauderの見方である．このあいまいさをうまく処理できる解が，フェルミ統計を生みだすというわけだ．実際，場の理論に現われる「履歴」は，Klauderの理論が出た頃人々が想像していた以上に，はるかに「手に負えない」しろものだということがわかってきた．この問題は，場の理論を一般的に扱うときに議論することにする．

フェルミオンに対する経路積分の現状は，まだ，未解決というのが，私の意見だ．実際，簡単かつ，直感的，そしてFeynmanのもとの経路積分より数学的に質が悪くない，そんなフェルミオンの理論が，場の理論にいまいちばん求められている．(30.9節参照）

ノート

この章の多くの題材は，

A. Casher D. Lurie, and M. Revzen, Functional Integration for Many-Boson Systems, *J. Math. Phys.* **9**, 1312 (1968)

S. S. Schweber, On Feynman Quantization, *J. Math. Phys.* **3**, 831 (1962)

J. S. Langer, Coherent States in the Theory of Superfluidity, *Phys. Rev.* **167**, 183 (1968)

の論文に見いだされる．コヒーレント状態が経路積分にはじめて使われたのは，

J. R. Klauder, The Action Option and a Feynman Quantization of Spinor Fields in Terms of Ordinary C-Numbers, *Ann. Phys.* **11**, 123 (1960)

である．もっと詳しくコヒーレント状態を勉強したければ，

I. R. Senitzky, *Phys. Rev.* **95**, 1115 (1954)

R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131**, 2766 (1963)

A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, 1961

を見よ．一般化されたコヒーレント状態は

A. M. Perelomov, Coherent States for Arbitrary Lie Group, *Commun. Math. Phys.* **26**, 222 (1972)

に定義されている．それらを，経路積分の基底系に使った論文は

J. R. Klauder, Path Integrals and Stationary-Phase Approximations, *Phys. Rev. D* **19**, 2349 (1979)

H. Kuratsuji and Toru Suzuki, Path Integral in the Representation of SU(2) Coherent State and Classical Dynamics in a Generalized Phase Space, *J. Math. Phys.* **21**, 472 (1980)

にある．オーバーコンプリートな基底系に関する問題点を明らかにする解析関数のヒルベルト空間は，

V. Bargmann, *Commun. Pure and Appl. Math.* **14**, 187 (1961)

V. Bargmann, On the Representations of the Rotation Group, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 829 (1962)

によって調べられた．$\{|n+im\rangle | n, m=$整数$\}$ の形のオーバーコンプリートな基底系は，

A. M. Perelomov, *Teor. Mat. Fiz.* **6**, 213 (1971)

によって発見された．これの数学的な帰結は，

M. Boon and J. Zak, Discrete Coherent States on the von-Neumann Lattice, *Phys. Rev. B* **18**, 6744 (1978)

に述べられている．そこでは，スピンに関連して出てきたヤコビのテータ関数が，重要な役割を果たしていることがわかった．擬スピン，アイソスピン，そして多体問題（物理的な回転に現われるものではなく）に現われる$SU(2)$は，

Harry J. Lipkin, *Lie Groups for Pedestrians*, North Holland, Amsterdam (and Wiley-Interscience) 1965, Ch. 2

J. J. Sakurai, *Invariance Principipies and Elementary Particles*, Princeton University press, Princeton, N. J., 1964, Sec. 9. 3

P. W. Anderson, *Concepts in Solids*, Benjamin, New York, 1963

に議論されている．量子力学における演算子の順序づけの問題，特に，経路積分への関連についての議論，論争は

Leon Cohen, *J. Math. Phys.* **11**, 3296 (1970)

E. Kerner and W. Sutcliffe, *J. Math. Phys.* **11**, 391 (1970)

E. J. Testa, *J. Math. Phys.* **12**, 1471 (1971)

J. W. Mayes and J. S. Dowker, *J. Math. Phys.* **14**, 434 (1973)

M. M. Mizrahi, *J. Math. Phys.* **16**, 2201 (1975)

J. S. Dowker, Path Integrals and Ordering Rules, *J. Math. Phys.* **17**, 1873 (1976)

A. C. Hirshfeld, Canonical and Covariant Path Integrals, *Phys. Lett.* **67A**, 5 (1978)

に見られる．経路積分は，他のいかなる量子化法とくらべて，演算子の順序づけの問題をそれ以上には解決しないだろうというDowkerの意見には，私も賛成する．しかし一方，経路積分を「より自然に」または「簡単に」実行できるようになれば，その結果として，「より自然な」または「簡単な」順序づけ規則が現われてくる可能性は依然として残っている．

コヒーレント状態経路積分から交換関係を導く方法，およびその応用は，

M. Revzen, Functional Integrals in Statistical Physics, *Am. J. Phys.* **38**, 611 (1970)

M. Revzen and L. S. Schulman, *J. Stat. Phys.***8**, 217 (1973)

の論文で考えだされた．

28章　臨界液滴，またはインスタントン，および準安定性

この章のタイトルは，もう少し劇的に表現してもよかったかもしれない．たとえば，「1次相転移の真性特異点」とか，「特異摂動論への第一歩」，あるいは（同類の研究がよばれているように）「擬真空の運命」などというのはどうだろう．実際には，ここでは非調和振動子を調べるだけであって，より大きな系に対する結論は，ほとんど類推によってその意味が敷衍される．

基本的な問題は，エネルギー（汎）関数にローカルミニマム（局所的安定点,極小値）があって，系が大きかれ小さかれ，そこにしばらく滞在し，最終的にエネルギーの低い別の場所へ移る経路を見つける，という過程である．いちばん簡単な例は，1粒子の量子系で，ポテンシャル上のローカルミニマムが不安定状態へ移行する場合である．その寿命は，しばしばWKBのトンネルの計算から得ることができる．より一般的な点から見ると，この状態は共鳴，あるいは，S行列に極をもつ状態である．基本的なもう1つの問題は，統計力学で見られる．準安定状態（たとえば，過冷却の蒸気）は，しばしば自由エネルギーのローカルミニマムと考えられ，凝縮して安定な基底状態へ落ちていくプロセスは，臨界液滴（臨界核）の核生成(nucleation)を経由して進むと考えられている．ここでは，計算の方法も，一般的な理論の枠組も，どちらも確固としたものではない．最後に，この種の問題意識は，場の量子論でもちあがってきたもので，インスタントンという用語が，統計力学の臨界液滴に相当している．

この章で行なうのは，1次元系の統計力学を解くことであるが，それは本質的に量子力学を行なうことと同じである．しかし，伝統的なトンネル現象の公式を使うかわりに，インスタントン理論を採用する．章末に原論文を参考文献として掲げ，応用分野も示しておいた．

周期的境界条件を課された1次元のスピン系を考える．最近接間の相互作用と自己相互作用だけを仮定する．スピン間の間隔がゼロに近づいて，適当な連続極限がとられたとすると，分配関数は

$$Z(\alpha)=\int d\varphi(x)\exp\left\{-\int_0^L\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2+\varepsilon\varphi^2+\alpha\varphi^4\right]dx\right\} \tag{28-1}$$

となる．ここで，Lは，円周の長さ，φはスピンの場，$d\varphi(x)$は汎関数積分の測度($\exp(-(1/2)\int\varphi^2dx)$と一緒に用いればウイーナー測度になる)，$\varepsilon$と$\alpha$はパラメータ．$Z$の$\varepsilon$と$L$に対する依存性は，式から落としてある．量$\varepsilon$は常に正．熱力学的極限は$L\to\infty$であり，無限系の単位体積あたりの自由エネルギーは

$$\psi(\alpha)\equiv-\lim_{L\to\infty}L^{-1}\log Z(\alpha) \tag{28-2}$$

である．$\alpha>0$に対しては，ポテンシャルエネルギー

$$V(\varphi)=\varepsilon\varphi^2+\alpha\varphi^4 \tag{28-3}$$

は，すべての実のφでは正で，汎関数積分は完全に問題なく定義できる．もちろん，$\exp(-\int\alpha\varphi^4dx)$を$\alpha$のべき級数で展開して，和と汎関数積分の順序の入れかえをしたのち，計算を実行してみると，結果は発散すると予想される．これは13章で見たことである．この章では，αの符号が変わるときになにが起きるかを見たい．このとき，Vは$\varphi=0$に極小をもち続けるが，大きな値のφでは，Vは負になり，(28-1)式の右辺は，実際存在しなくなる．

このようなわけで，望めるのは，たかだか，$\mathrm{Re}\,\alpha>0$から$\mathrm{Re}\,\alpha<0$へと変わるときの$\psi(\alpha)$の解析接続ぐらいのものである．この解析接続がなんであるかがわかれば，(28-1)式の汎関数積分の役割と，$\mathrm{Re}\,\alpha<0$におけるその意味するところがわかるであろう．この手続きがどのように数学的に保証されるかわからないが，とにかくやってみよう．

まず，(28-1)式のような式を扱う標準的な方法はなんだろうか？ (28-2)式を見ると，ファインマン - カッツ公式の1例だということがわかる（TをLで置きかえよ）．(28-1)式を7章の結果とくらべてみると，ψがハミルトニアン$(1/2)p^2+V$の基底エネルギーに対応している．これを，$E_0(\alpha)$と書こう．$\alpha>0$では，$E_0(\alpha)$は完全に定義できる量である．$\alpha<0$では安定な基底状態はないが，$|\alpha|$が小さい場合には，近似的に定常になっている状態があり，その寿命はトンネル理論の公式で評価することができる．この際，再び標準的な考えに基づけば，崩壊速度はエネルギーの虚数部分に関係しているから，$E_0(\alpha)$の解析接続をやり遂げれば，負のαにおけるE_0の虚数部分を見積もることができる．

われわれが用いる方法では，(28-1)式の被積分関数の極値を捜す．というわけで，技術的には，13章のWKB法と本質的に同じものだ．素朴な感覚からすれば，ラプラス法，すなわち，実数の積分変数で実際に最大値を求めたいのだが，解析接続では，そのような素朴な方法では危ないことがわかる．いま，

$$S(\varphi)=\int_0^L dx\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2+\varepsilon\varphi^2+\alpha\varphi^4\right]$$

と書く．Sを変分（すなわち$\delta S=0$）すると，

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=2\varepsilon\varphi+4\alpha\varphi^3\equiv-\frac{\partial}{\partial\varphi}U(\varphi) \tag{28-4}$$

が得られる．関数$U(\varphi)$は，まさに$-V(\varphi)$であり，Vは(28-3)式で与えられている(なんだと思われるかもしれないが，ただマイナスをつけるだけで，ものごとがはっきりするのだ)．

最初に，定数解，$d\varphi/dx=0$を考えよう．明らかに，$\varphi=0$は常に解である．非定数の解に対しては，(28-4)式は，本質的に古典力学の問題そのものである．ここでは，xが時間で，φが位置の役割をしている．（分配関数につけた）周期的境界条件から，$\varphi(0)=\varphi(L)$を満たす経路だけを考える必要がある．しかも，$\varphi=0$の近傍から出発して，そこに到着する経路に注目しておけばよい．他の経路は，全時間のうちの，有限の割合の間はゼロから離れた点にいる．したがって，これらは，$\varphi(0)\sim0$の経路からの寄与とはLの倍数だけ異なった作用積分を与える[脚注(1)]．

$\alpha>0$では，$\varphi(x)\equiv0$以外は，$\varphi=0$で始まり$\varphi=0$で終わる経路は存在しない．したがって，本書の前のほうで使った言葉を使うならば，軌道は1本だけで，経路に沿って評価すべきδ^2Sにかかわるガウス積分もこれだけで決まる．これらの積分は，$\varphi\equiv0$の経路についてはδ^2Sに対するφ^4の寄与はないから，調和振動子の場合の積分と同じものである．

さて，$\alpha<0$を考えよう．ここでも，(28-4)式で，Zに最大の寄与をするSの極値を捜す（この過程は，ひらめきといってよい部分である．きれいな結果が出てくるのに，数学的な根拠が欠けている）．定数解$\varphi(x)\equiv0$は，ここでも正しい．これ以外に，定数解$\varphi=\pm\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$がある[脚注(2)]．これらの作用積分は，$\varphi\equiv0$のそれとは$L$の

脚注(1)　ここで注意がいるのは，ゼロではないφから出発してそこへ戻ってくる周期的な非定常解の経路があって，その作用積分がLのオーダーでないものがあるということである（これらの経路は，$\varphi=0$に到達するための適当な運動量をたまたまもっており，Lのオーダーの「時間」の間ゼロに滞在し，その後，初期位置に落ちていく）．これらの寄与が無視できる理由を見るために，われわれの方法が，全体としてファインマン-カッツ公式に基づいていることを思いだしてみるとよい．7章で指摘したとおり，(28-1)式を$L\to\infty$の極限で評価するには，$\mathrm{Tr}\exp(-LH)=\int du G(u,\ -iL\ ;u)$（ここで$u=\varphi(0)=\varphi(L)$）を使うことが本質的ではなく，むしろ，ある空間の特定の点にあるGをとるとか，小さい空間の領域だけの積分に置きかえることができる．こうして，付加的な条件として$\varphi(0)=\varphi(L)=0$を要請することができる．以下で述べるインスタントン経路については，こうしても，なにも問題が起きない．それは，$x=0$と$x=L$で$\mathrm{O}(\exp(-L\langle\mathrm{const.}))$となるからである．

脚注(2)　境界条件$\varphi(0)=\varphi(L)$のもとでは，これらの経路は近似的にしか現われない．つまり，点$\varphi=\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$（あるいは$\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$）へ急いで行って，ほぼ$t=L$までそこに留まり，急いでゼロに戻るような経路である．たまたま，定数経路の解$\varphi=\pm\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$の項は，無視できるが，本当の解だったら考慮しておかなければならない．

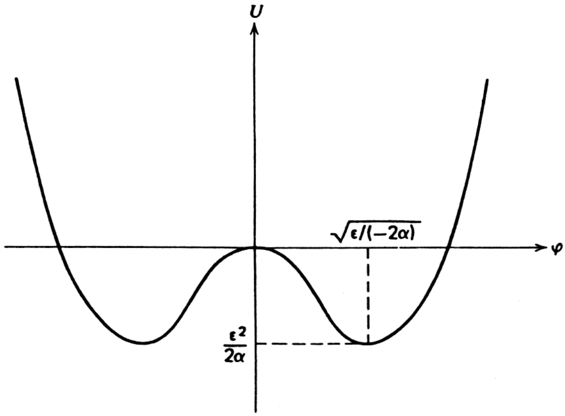


図28.1　$u(\varphi)=-\varepsilon\varphi^2-\alpha\varphi^4$．ただし $\alpha<0$

オーダーで異なっている[脚注(3)]．

さて，しかし，$\varphi(0)=\varphi(L)\sim 0$ を満たすもので，定数ではない解が存在する．図28-1は，$\alpha<0$ における $U(\varphi)$ を描いたものであるが，これらから，解の性質がはっきりする．$x=0$ で粒子は $\varphi=0$ のごく近くから出発する．$\varphi=0$ から離れるように動きはじめるといっても，$L\to\infty$ だから，非常に長い時間がかかるにちがいない．したがって，ほとんどエネルギーなしで出発すると，L のほとんどすべての時間を $\varphi=0$ から離れるのに使って，$x\to L$ になると再びこの山に上がって帰ってくる．もちろん，途中のある時間では，谷を下って $\varphi=+\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$ （または $\varphi=-\sqrt{-\varepsilon/(2\alpha)}$ ）を通過する際にスピードが上がっており，谷の反対側を登ることになる．(28-4)式にはたまたま解析解がわかっており

$$\varphi_z(x)=\pm\left(\frac{\varepsilon}{-\alpha}\right)^{1/2}\operatorname{sech}\left[\sqrt{2\varepsilon}\,(x-z)\right] \tag{28-5}$$

である．ここで，z は任意の数．z を選ぶ自由度は，本質的に間隔$[0, L]$のどこからでもとれるが，その理由は，$|x-z|$ が L のオーダーになったとき，sech が小さな値

脚注(3)　作用積分の差が $O(L)$ のオーダーの項は落ちてしまう．というのは，われわれは $\psi\sim(1/L)\log Z$ を見ているからだ．ψ は，

$$\begin{aligned}\frac{1}{L}\log Z&=\frac{1}{L}\log(Z_{\varphi=0}+Z_{\varphi=\sqrt{-\varepsilon/2\alpha}})\\&=\frac{1}{L}\log\left\{Z_{\varphi=0}[1+O(\exp(-\text{const}\cdot L))]\right\}\\&=\frac{1}{L}\log Z_{\varphi=0}+\frac{1}{L}\exp(-\text{const}\cdot L)\end{aligned}$$

をとることからきている．原理的には汎関数積分に入ってくる関数は周期的でなければならない．φ_zを周期的にしてやっても，Sにはほとんどなんの効果もない．というのは，φ_zは，0とLの近くでは小さいからだ．このようなわけで，φ_zをそのように変更しても，(28-5)の場合と本質的に同じ寄与になってしまい，違いは無視できる．経路の作用積分も直接計算することができて，

$$S(\varphi_z)=\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{-3\alpha} \tag{28-6}$$

となる．

これらの解をより詳しく解析する前に，$\alpha<0$における分配関数の一般的構造を示しておこう．まず，

$$Z=Z_0+Z_1+Z' \tag{28-7}$$

と書く．Z_0は$\varphi\equiv 0$からの寄与である．これは$\alpha>0$の場合に対応する量とたいして違わず，$\varphi\equiv 0$に沿って計算するべき$\delta^2 S$のガウス積分を実行すれば，近似的に得られる．しかし，われわれに本当に必要なのは，この量の，ほかの量に対する比なので，先送りする．Z_1は，経路φ_zからの寄与である．最後に，Z'は残りの項全部．これについてはあとで詳述する．

つぎの仕事にとりかかろう．ここからおもしろくなるのだ．φ_zの解のまわりの微小振動積分，すなわち，φ_zに沿った$\delta^2 S$にかかわるガウス積分を行なう．$\eta=\varphi-\varphi_z$とすると，

$$S(\varphi)=S(\varphi_z)+\int_0^L dx\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\eta}{dx}\right)^2+\varepsilon\eta^2+6\alpha\varphi_z^2(x)\eta^2\right] \tag{28-8}$$

と書くことができる．前にWKB近似でやったように，2次変分は，シュレーディンガー型をしている補助的な微分方程式

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\eta_j}{dx^2}-6(-\alpha)\varphi_z^2(x)\eta_j+\varepsilon\eta_j=\lambda_j\eta_j \tag{28-9}$$

を使って，対角化できる．(28-9)式の規格化された固有関数を使って，φ_zからの任意のずれは

$$\eta(x)=\sum_j a_j\eta_j(x) \tag{28-10}$$

と展開することができる．それに対応して，作用積分は

$$S(\varphi)=S(\varphi_z)+\sum a_j^2\lambda_j \tag{28-11}$$

となる．汎関数積分の積分変数は$d\varphi$で出発した．しかし，ラプラス法を使う場合には，暗黙のうちに$d\eta$のほうに移行してしまっている．(28-10)式を利用すると，さらに変数変換ができ，各モードについて積分することができる．汎関数積分の全体に規格化因子をつけて，新しい積分体積が

$$\prod_j \left(\frac{da_j}{\sqrt{\pi}} \right)$$

になるようにしておく（この規格因子を$\mathfrak{N}$とよんでおく．ここでは，計算する必要はない）．こうして，(28-11)式を含むガウス積分は，単純に$1/\sqrt{\lambda}$となる．運がよいことに，(28-5)式の解を(28-9)式に代入すると，シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\eta_j}{dx^2} - 6\varepsilon\,\mathrm{sech}^2\left[\sqrt{2\varepsilon}\,(x-z)\right]\eta_j + \varepsilon\eta_j = \lambda_j\eta_j \qquad (28\text{-}12)$$

となり，ここからいくつか情報が得られる．2つだけの束縛状態があり，その固有関数と固有値は

$$\eta_0(x) = \sqrt{\tfrac{3}{4}}\,(2\varepsilon)^{1/4}\mathrm{sech}^2\left[(x-z)\sqrt{2\varepsilon}\,\right] \qquad \lambda_0 = -3\varepsilon$$

$$\eta_1(x) = \sqrt{\tfrac{3}{2}}\,(2\varepsilon)^{1/4}\frac{\sinh\left[(x-z)\sqrt{2\varepsilon}\,\right]}{\cosh^2\left[(x-z)\sqrt{2\varepsilon}\,\right]} \qquad \lambda_1 = 0 \quad (28\text{-}13)$$

である．この問題に関連して出てくる興味があり，かつ，やっかいなことがらは，すべてこの2つの状態に由来している．残りの状態は，$\lambda_j>0$をもつ．これらλの積を評価すること（これはδ^2Sを計算するためにしなければならないこと）は自明とはいえないが，概念的には困難なことはなにもない．

(28-13)式から，a_0で積分すると

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int da_0 e^{3\varepsilon a_0^2} \qquad (28\text{-}14)$$

は発散する．一方，a_1積分の指数関数の変数はちょうどゼロである．それぞれの発散には，それぞれの物理が隠されている．これを理解するには，われわれの結果に対する解釈をしておかなければならない．極値φ_zが，(28-13)式より，Sの鞍点であって，最小値ではないことは明らかである．$[0, L]$上で周期的な関数の空間では，$\varphi\equiv 0$はローカルミニマムではあっても，大域的な最小値ではない．$\alpha<0$だから，大きなφをもつ経路は，（代数的に）はるかに小さなSの値をとるからだ．ローカルミニマムの谷から，はるかに小さなSの経路がいる深さに移行するには，最初に登って，そのあと下らなければならない．関数空間のなかを登って下る経路のうち，可能なかぎり少ししか登らないで済むものがある．それは山なりの道や峠を通過する道路みたいなものである．それは，また，Sの極値であって，実際われわれが見つけた経路φ_zがそれである．峠では，ほとんど頂上がそのまわりで立っている

（$j \neq 0$, 1 で $\lambda_j > 0$ に対応する）という性質をもっている．しかし，少なくとも1方向には，谷から大域的な最小値を結ぶ方向の，最大値になっている．われわれはいま，関数空間のなかにいるのだから，この「方向」という言葉は，モード，つまり，経路 φ_z のまわりの不安定化ゆらぎに対応する．最後に，これを統計力学の言葉で説明してみよう．関数 $\varphi \equiv 0$ は一様にゼロに磁化された状態．$\alpha < 0$ なので，極端に大きな j の状態は，実際，深い自由エネルギーをもつ状態である（この単純化されたモデルには，大きな φ に安定な状態が形成される理由の説明がない．おそらく，離れたところに，われわれが関知しない，ある大域的な最小値が存在している．たぶん，この最小値を適切に扱うことができれば，$\alpha < 0$ の場合に(28-1)式に対して行った数学的な処理が，正当化できるかもしれない）．もし，系がゆらいで，$\varphi \equiv 0$ から離れてしまうと，大きな値の φ に落ちこむであろう．山なりの道を，エネルギーというお金で計算すると，いちばん安いやり方で，このゆらぎが起きる．これは，厳密に，準安定性理論における臨界液滴の役割である．モード η_0 は，液滴のサイズを増減させることを表現する．増加も減少も不安定化であり，一方は，S の大域的最小値をもつ大きな φ に系を移動させ，他方は，系を $\varphi = 0$ に引き戻す．したがって，φ_z は，準安定状態 $\varphi \equiv 0$ が壊れたとき，系が通過しなければならない主な障壁になっている．この準安定状態の寿命を計算するには，a_0 の積分を見てやればよい．場の理論では，変数 x は時間であり，励起が局在するということは，時間軸上で局在するということである．よって，φ_z はインスタントン解とよばれる．

以上の描像から，η_1 についての解釈も得られる．数学的には S は並進不変である．したがって，0 から L までの間のどの z に対しても解 $\varphi_z(x)$ が存在する．これは，任意のパラメータ z が φ_z に現われていたのだから，もちろん最初から存在していた問題である．そこでは，1個だけの解を求めるというよりも，それらの1次元ファミリーをもつということに注意した．(28-12)式のゼロ固有値は並進不変性が別の形で現われたものであり，波動関数 η_1 は $d\varphi_z/dz \sim (\varphi_{z+\Delta} - \varphi_z)/\Delta$ に比例する．これは，統計力学では，体積のどこにでも臨界液滴が現われうるという事実に対応している．

ここまでで，われわれは，二重の計算をしていたことがわかった．z の積分を実効して，すべてのインスタントン的極値を足しあわせることは，a_1 上の積分と同じ結果をもつ．いずれにせよ，並進不変性を考慮するならば，どうやっても因子 L（“体積”）を導入しなければならない．われわれは，a_1 ではなく，z の積分を行なう．しかし，η_1 は1に規格化されていたため，汎関数は dz ではなく，da_1 の積分を含んでいる．これらの間の関係は，$\eta = \varphi_{z+dz} - \varphi_z$ の形の経路を考慮すれば得られる．この経路は，“全面的に” η_1 の方向にあるので，

$$\varphi_{z+dz} - \varphi_z = \frac{d\varphi_z}{dz} dz = \eta_1 da_1$$

と書くことができる．a_1からzへの変換のヤコビアンは，したがって，関数のノルムの比である．よって，a_1上の積分は

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int da_1=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int dz\left\|\frac{d\varphi_z}{dz}\right\|=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[\int\left(\frac{d\varphi_z}{dz}\right)^2dx\right]^{1/2}\int dz$$
$$=\frac{(2\varepsilon)^{3/4}}{(-3\alpha)^{1/2}}\frac{L}{\sqrt{\pi}} \tag{28-15}$$

となる．最終的な結果では，(28-15)式の項は2倍して，インスタントンが左右のどちらにも向けるようにしておかなければならない．

da_j, $j>1$上での積分から，$(\Pi'_j\,\lambda_j)^{-1/2}$が出る．このダッシュ記号は，$j=0$と1は積から除外されていることを表わす．また，全体の規格化因子は除いた．知りたいことは，この積[(28-7)式のZ_1に現われた]のZ_0に対する比だけである（付録参照）．

その他すべてを脇に置いておいても直面せざるをえない問題は，積分(28-14)式が明らかに発散をもつことである．けれども，（ここまでくると誰でもそういいたくなるが），本当に興味があったのは(28-1)式ではなく，その解析接続だけだったはずである．しかも，積分のすべての悪いふるまいが，たった1個の積分

$$J=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int da_0e^{3\varepsilon a_0^2} \tag{28-16}$$

に集約されているように見える．しかし，この積分については，どうやって解析接続すればよいのかわかっているではないか．

この解析接続がどんなものか復習しておこう．

$$F(\mu)\equiv\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\mu z^2}dz \tag{28-17}$$

とおく．$\mathrm{Re}\,\mu>0$で，$F(\mu)$は関数$G(\mu)$,

$$G(\mu)\equiv\frac{1}{\sqrt{\mu}} \tag{28-18}$$

に等しい．Fの$\mathrm{Re}\,\mu\leqslant0$への解析接続はやさしい．単に，いたるところで，$F=G$とすればよい（もちろん，$F$と$G$の両方には，$\mu=0$で分岐点が現われる）．しかし，$\mathrm{Re}\,\mu<0$に対しては，(28-17)式の右辺の積分は，その形のままでは定義できない．しかし，接続された関数が依然として積分の形をしているような解析接続の方法もある．(28-17)式で実のz軸から$z=e^{-i\theta}x$, $-\infty<x<\infty$へと，積分経路を変更することを考える．もともと(28-17)式は，$-\pi/2<\arg\mu<\pi/2$で定義されていた．いまそれは，$-\pi/2<\arg\mu-2\theta<\pi/2$で定義されている．したがって，$\theta=\pi/2$ととれば，$F$

は負半面に解析接続されたことになる（積分経路上の無限遠点での寄与はゼロであることに注意）．接続された関数は，積分形で書かれており，

$$F(\mu)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-i\infty}^{i\infty}e^{-\mu z^2}dz=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\mu x^2}i\,dx=i\sqrt{\frac{1}{-\mu}} \tag{28-19}$$

のようになっている．このような接続の意味において，(28-16) 式の積分 J を

$$J=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{i\infty}da_0e^{3\varepsilon a_0^2} \tag{28-20}$$

と解釈するのである（あるいは，平方根の別の接続を与える $\int_0^{-i\infty}$ でもよい）．実の a_0 軸に沿っての積分は，0から＋（または－）の $i\infty$ にいたる縦軸になる．積分（というより解析接続）は，(28-19) 式で示唆されたものとは違って，$-i\infty$ から $+i\infty$ へ走るわけではないことに気がついただろうか．この変更で，最終結果に1/2の因子がつくが，これについては少しコメントしておく価値がある．統計力学の言葉を使うと，φ_z は臨界液滴であり，モード a_0 は微視的な配置空間における不安定方向である．a_0 が（ゼロから）増加すると，臨界液滴は成長し，自由エネルギーは減少する．a_0 が負の方向に減少することは，形が準安定状態の最小値 $\varphi\equiv0$ に戻ることを表わしている．したがって，積分範囲 $(-\infty, 0]$ は準安定の基底状態の寄与を与えることになるから，$-\infty<a_0<0$ の積分範囲で得られる無限大は偽物である．つまり，積分は実際にはガウス型ではなく，大きな負の値の a_0 に対しては，準安定基底状態の寄与をとりあげているだけなのである．これらの寄与は $\varphi\equiv0$ のまわりの積分に適切な形で含めておかなければならない．ここでの問題でもっと本質的なことは，これらは Z の実部だけに寄与し，おそらく，わずかばかり変えるということである．いちばん当惑させられるのは，$[0, \infty)$ の範囲で，そこでは自由エネルギーがはるかに深くなることである（このモデルでは，無限に深くなってしまう．安定な状態を含んだモデルでは，L のオーダーで深くなる）．したがって，シフトさせる必要があるのは，0から $+\infty$ の積分である．これは，a_0 の正か負の虚軸に回転することができて，上に書いた結果を与える．図28-2を見よ．ある意味では，虚軸へ移るということは，外向き境界条件を表わすが，この類推を精密化する方法を，私は知らない．(28-20) 式によって，

$$J=\pm\frac{i}{2}\sqrt{\frac{1}{3\varepsilon}} \tag{28-21}$$

であり，こうして自由エネルギーは虚数部分を獲得したことになる．

負エネルギーモードは，この問題にとって重要なので注意しておきたいのだが，上に与えた $\eta_0(x)$ の解がたとえなくても，その存在が推定できていたのだ．この事実は，他のポテンシャルを扱っているときに，不幸にして（あるいは十分冴えなく

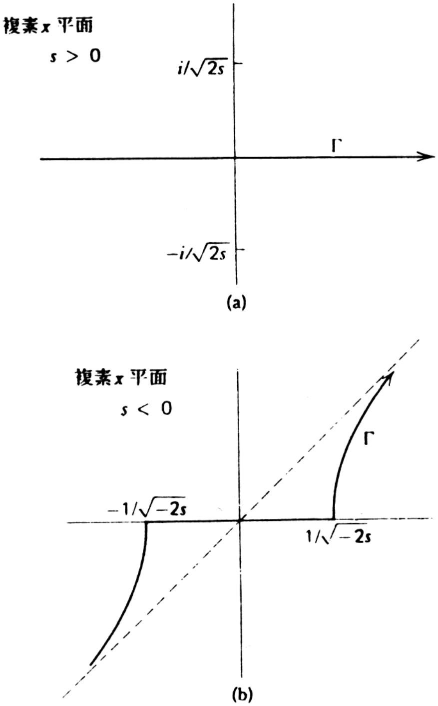


図28.2　下限がゼロの積分(28-20)式にいたる解析接続は，積分$f(s)=\int_\Gamma dx\exp(-x^2-sx^4)$を使うと理解できる．この積分によると，汎関数積分(28-1)式の解析接続についても，一般的な方法で調べることができる．(*a*)Res>0 に対しては，*G*は実軸ととる．変数変換によって$f(s)=(1/\sqrt{s})\int_{-\infty}^{\infty}\exp[-(1/s)\succ(y^2+y^4)]dy$となるから，小さな$s$に対しては，主な寄与は$y=0$からくる．$y=\pm i/c\succ$にある被積分関数の別の極値は，なんの役割も果たさない．(b)Res<0では，実軸は積分経路としては，受けいれられないが，本文で説明したように，$f(s)$は積分経路を回転して解析接続することができ，その漸近形がRe$(sx^4)>0$を満たすようにすることができる［(13-20)式に引き続く議論も見よ］．$s<0$では，Γを45度と225度に漸近させれば，これを満たす．$|s|\to 0$では，積分の計算は，0と$x=\pm(-2s)^{-1/2}$にある，停留点を通過するのがいちばんよい．こうして，図の積分経路が得られる．ここで，積分経路が実軸から離れるのは，最急降下法を使うと，停留点での90度回転によって起きてくる．小さい$|s|$では，Re$f(s)$は，負のsに移ってもそんなに変わらない．というのは，非ゼロの極値は，ゼロから遠く離れているから．被積分関数を$x=(-2s)^{-1/2}$のまわりで展開していたとすると（インスタントンのアナロジー），$x\leqslant(-2s)^{-1/2}$からくる実部は，大きくなっていくガウス関数のように見えていたことであろう．しかし，これは，$x=0$から減少していく被積分関数の終わりの部分にすぎないことが，いまならわかる．こういうわけで，本文では，$-\infty<a_0<0$からの無限大を「偽物」とよんだのである．fの虚部は，複素数のxの方向に向かっているΓの部分からくる．積分が変数$a=x-(-2s)^{-1/2}$で書かれているとき，（積分経路の右側からくる）主な寄与は，aの2次の項からくる．ただし，積分は，$a=0$から始まり，Ima>0に行く，$x=-(-2s)^{-1/2}$にある停留点は，同じように扱うことができる．

て）あらわな形で解が書きおろせない場合に，知っておくと得をする．論理は以下のように流れる．並進不変性のおかげで，ゼロエネルギーモードの存在が保証されている．インスタントンはゼロから出発してゼロで終わり（注意：扱う問題によっては，インスタントンは周期的ではない），かつ，なめらかであるから，その微分はどこかでゼロになる．よって，ゼロエネルギーモード，つまりインスタントンの微分は，どこかでゼロにならなければならない．しかし，それを，あるシュレーディンガーのような方程式の解だと思うと，それにはノードがあるから，基底状態とはいえない．したがって，少なくとも1個，より低いところに（したがって負の），ノードをもたない解が存在する．

以上，得られた結果をまとめると，

$$Z = Z_0 + Z_1 + Z'$$

$$Z_0 = \int_{(0,0)}^{(0,L)} d\eta \exp\left\{-\int_0^L \left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\eta}{dx}\right)^2 + \varepsilon\eta^2\right] dx\right\} = \mathfrak{N}\prod_j \lambda_j^{(0)-1/2}$$

$$Z_1 = \mathfrak{N}\left(\pm\frac{i}{2}\sqrt{\frac{1}{3\varepsilon}}\right)\left[\frac{2(2\varepsilon)^{3/4}L}{(-3\alpha)^{1/2}\sqrt{\pi}}\right]\exp\left(-\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{(-3\alpha)}\right)\prod_j{}' \lambda_j^{-1/2} \quad (28\text{-}22)$$

となる．上に現われた規格化因子 $\mathfrak{N}$ は，2つの式で共通．量 $\lambda_j^{(0)}$ は状態 $\varphi\equiv 0$ のモードに対応する．Z_1 のなかの積についたダッシュは，$j=0$ と1を除くことを意味する．

最後に，なにが残っているだろうか．それは Z' で，（だれにでもわかっているかぎり），おもにマルチインスタントンからなる．すでに考えた解 φ_z のほかに，$\varphi=0$ から出発して，2回以上行き来する解が存在する．インスタントンは非常に局在化しているため，その作用積分への補正［および(28-4)式の厳密解からのずれ］は無視できるほど小さい．また，マルチインスタントン励起の作用積分は個別に足しあわせておけばよい，つまり，加法的である．個々のインスタントンのまわりのブロウアップ(blowup)モードは，別の寄与になる．しかし，（並進不変性による）ゼロモードについてだけは，少し注意を要する．インスタントンの中心位置のすべての可能性について和をとるとき，インンスタントンは，区別できない同種粒子のように見える．したがって，n インスタントンモードに対しては，単に L^n ではなく，$L^n/n!$ としなければならない．

Z_1 と Z' の分配関数への寄与は，厳密に，励起した希薄気体からのもののように見える．希薄といったのは，互いに相互作用がないということからきているわけで，作用積分が加法的であることに対応している．したがって，もし

$$Z = Z_0\left(1 + \frac{Z_1}{Z_0} + \frac{Z'}{Z_0}\right)$$

と書くと，Z'/Z_0は，$(Z_1/Z_0)^k/k!$, $k=2, 3, \dots$の項からなることがわかる（もちろん，作用積分を足すということは，分配関数を掛けるということだから，kインスタントンについては，$(Z_1/Z_0)^k/k!$）．しかし，よく見ると，これは指数関数の展開形だから，最終的に

$$Z=Z_0\exp\left(\frac{Z_1}{Z_0}\right) \tag{28-23}$$

となる．ずっとわれわれの頭にあったのは，ψの虚数部分だった．これは，Z_0が実だから，

$$\operatorname{Im}\psi(\alpha)=-\frac{1}{L}\lim\ \operatorname{Im}\left(\frac{Z_1}{Z_0}\right)$$
$$=\pm\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{3\varepsilon\pi}}\left[\frac{2(2\varepsilon)^{3/4}}{(-3\alpha)^{1/2}}\right]\exp\left[\frac{-(2\varepsilon)^{3/2}}{(-3\alpha)}\right]\frac{\Pi'\lambda_j^{-1/2}}{\Pi\lambda_j^{(0)-1/2}} \tag{28-24}$$

の形をもつ．あとの付録に与えた，連続状態の積の比に対する式をもってくると，

$$\operatorname{Im}\psi(\alpha)=\pm\frac{2^{7/4}\varepsilon^{5/4}}{(-\pi\alpha)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{(-3\alpha)}\right] \tag{28-25}$$

を得る．こうして，ψには，負で実数のα軸に沿って切断があり，その切断に沿って特異性の高い不連続性がともなっている．これは一般的に，1次相転移にともなう真性特異点といわれる．ただし，真性特異点の数学的な定義（すなわち，変数の任意に大きい逆べきを含むローラン展開をもつ有理形関数）が満たされているかどうかははっきりしていない．

真性特異点，あるいは実際なんらかの特異点が，1次相転移にあるのだろうか．誰も，確信をもってわかっているとはいえない．長距離相互作用がある系（たとえば，ファンデルワールス系，適当な極限にあるKac-Hemmer-Uhlenbeckの系）では，自由エネルギーは，相転移を通過するときでも解析的である．これは，臨界液滴，あるいは他の凝縮的な励起が，無限のエネルギーをもつからである．短距離力の系については，上に与えた計算から，特異点があると確信できる．しかし，相互作用しないインスタントンの仮定については，批判的にならざるをえない．これは，$\alpha\to0$では，特異点はますます大きな液滴によってつくられることになるから，作用積分が単に加法的に扱えるほど，互いに十分離れているとは想像できないからだ．Fischerは，かつて，すこし変わった相互作用をもつものの，別々の液滴がまったく相互作用しないという利点をもつモデルを発明したことがある．これだと，系が凝縮する際，真性特異点を示した．しかし一方，Sewellによると，凝縮状態から

「気相」へ移るときでも，自由エネルギーは解析的なままだった．パーコレーション理論にも，相転移で真性特異点を示した結果がある．

この章に示した計算は，他の多くのポテンシャルに対しても実行されうるし，また，実行された．しかし，本質的な結果や，技術的なことは同じである．この例をとりあげたのは，あらわに解かれている結果がたくさんあるからであって，特に，1967年のLangerの大傑作のおかげでもある．

付録：　インスタントンのまわりの微小振動

(28-24)式によって，比

$$A = \frac{\prod_j' \lambda_j^{-1/2}}{\prod_j \lambda_j^{(0)-1/2}} \tag{28-26}$$

を計算したい．ここで，記号は(28-22)式にしたがって定義されている．ダッシュがついていない積は（規格化定数まで含めて），$\varphi \equiv 0$ のまわりの振動の $\delta^2 S$ の無限2次形式の行列式を表わす．もし，ダッシュつきの積に，そこに現われていない2つの固有値を掛ければ，こちらもまた，行列式になる．しかし，6章から，これらの行列式は，それぞれの極値についてのヤコビ方程式を満たすことがわかっている．したがって，(28-26)式の A は，本質的にヤコビ方程式の解の間の比である．だから，われわれに必要なのは，ヤコビ方程式の解だけ，というように見える．不安な点は，インスタントンモードについては，$\delta^2 S$ の固有値の1つはゼロと予想されるから，それが分母に使うことには問題がありそうなことだ．幸いにして，この「ゼロ」の予想は，$\exp(-L)$ のオーダーの項のおかげで，正しくない．むろん，分母のほうも問題ない．

詳しく見てみよう．$f^{(0)}$ と f_z を

$$\frac{1}{2}\frac{d^2 f^{(0)}(x)}{dx^2} - \varepsilon f^{(0)}(x) = 0 \tag{28-27}$$

$$\frac{1}{2}\frac{d^2 f_z(x)}{dx^2} - \varepsilon f_z(x) + 6\varepsilon\,\mathrm{sech}^2\left[\sqrt{2\varepsilon}\,(x-z)\right] f_z(x) = 0 \tag{28-28}$$

の解とする．ただし，境界条件は

$$f^{(0)}(0) = f_z(0) = 0$$
$$\frac{df^{(0)}(0)}{dx} = \frac{df_z(0)}{dx} = 1 \tag{28-29}$$

である．固有値 λ_j（あらわな z 依存性を省略する）は，(28-9) 式で定義されている（もちろん，境界条件 $\eta_j(0)=\eta_j(L)=0$ のもとで）．量 $\lambda_j^{(0)}$ はちょうど，(28-9) 式のような方程式の固有値として，定義されるが，こちらの方程式には $\alpha\varphi_z^2$ の項が含まれていない．

A についてに述べたことは，今度は，精密に定式化できて，

$$A^2=\frac{f_0(L)}{f_z(L)/\lambda_0\lambda_1} \tag{28-30}$$

となる．

さらに進む前に，A が z に依存しないから，z を $L/2$ に固定し，今後 z を下つき文字から落してしまう．

つぎは，$\lambda_1 \ldots$ がゼロになるかということである．これは，解(28-13) 式に基づいて判断できるが，$\eta_1(x)$ は，端点では，$\mathrm{O}(e^{-L/2})$ の大きさの程度で，ゼロにはならないことに注意．したがって，λ_1 は少しゼロよりも大きい．というのは，実際の固有関数は，端ではゼロにならざるをえないからだ．この値を評価する前に，$f(L)$ を計算しておくとよい．これを計算するときのテクニックが，λ_1 のそれにも入ってくるからである．

やさしい部分を処理するために，

$$f^{(0)}(L)=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}\sinh L\sqrt{2\varepsilon}\sim\frac{1}{2\sqrt{2\varepsilon}}e^{L\sqrt{2\varepsilon}} \tag{28-31}$$

を見ておく．さて，$\eta_1(x)$ ［(28-13) 式で $z=L/2$ とおいた η_1］は，(28-28) 式を厳密に満たす．しかし，境界条件(28-29) 式を 100 パーセント満たすわけではない．もちろん，2 階の微分方程式(28-28) 式は，2 番目の線形独立な解をもっていて，それを ξ_1 とすると，これらの適当な線形結合で (28-29) 式を満たすようにすることができる．そこで，

$$f(x)=u\eta_1(x)+v\xi_1(x) \tag{28-32}$$

とする．（f は $f_{L/2}$ と同じもの）．η_1 と ξ_1 のロンスキアンは，定数で，それを 1 ととる．つまり，

$$\eta_1\frac{\partial\xi_1}{\partial x}-\xi_1\frac{\partial\eta_1}{\partial x}=1 \tag{28-33}$$

$x=0$ における，条件(28-29) 式から

$$0=u\eta_1(0)+v\xi_1(0) \tag{28-34}$$

$$1=u\frac{d\eta_1(0)}{dx}+v\frac{d\xi_1(0)}{dx} \tag{28-35}$$

が要求され，ここから

$$u=-\xi_1(0) \qquad v=\eta_1(0) \tag{28-36}$$

が得られる．しかし，(28-33) 式で，定数を要求することだけで，ξ_1 についてほしい情報はすべて手に入る．その関数形から，大きな $|x-L/2|$ に対して，

$$\eta_1(x)\sim N\exp\left(-\kappa\left|x-\frac{L}{2}\right|\right)\operatorname{sign}\left(x-\frac{L}{2}\right)$$

$$N=2\sqrt{\frac{3}{2}}\,(2\varepsilon)^{1/4}, \qquad \kappa=\sqrt{2\varepsilon} \tag{28-37}$$

となる．(28-28) 式から，$L/2$ から離れた点では，(28-28) 式の線形独立解は

$$\exp\left(\pm\kappa\left(x-\frac{L}{2}\right)\right)$$

だから，ξ_1 は漸近形

$$\xi_1(x)\sim N'\exp\left(+\kappa\left|x-\frac{L}{2}\right|\right) \tag{28-38}$$

をもたなければならない．大きな値の $|x-L/2|$ における ξ_1 の符号を決めるのは，(28-33) 式である．これから，また，定数 N' $(N'=1/2\kappa N)$ も決まり，同時に u と v が決まる．u と v から，$f(L)$ がただちに得られて

$$f(L)=\frac{1}{\kappa} \tag{28-39}$$

となる．

固有値 λ_0 と λ_1 だけが，まだ決められていない．しかし，λ_0 はちょうど -3ε であって，いまの目的にはこれで十分正確である（実際，λ_0 の絶対値は計算からまったくキャンセルされてしまう．というのは，それを(28-30) 式に代入すると，(28-21) 式のおかげで存在していた(28-22) 式から消えてしまうからである．λ_0 について本当に知りたいことは，それが負の値をもつ，ということだけだった）．厳密な λ_1 は，

$$Hf+\lambda f\equiv\frac{1}{2}\frac{d^2f}{dx^2}-Q(x)f+\lambda f=0 \tag{28-40}$$

の固有値として定義される．ただし，$Q=\varepsilon-6\varepsilon\,\mathrm{sech}^2[\kappa(x-L/2)]$ で，$f(0)$ と $f(L)$ は厳密にゼロである．方程式(28-40) 式は，量子力学のリップマン - シュウィンガー方程式と同じようにして，積分方程式に書きかえることができる．G を無摂動の演算子 H のグリーン関数，すなわち

$$H_xG(x,y)=\delta(x-y)$$

とする．境界条件$G(0, y)=0$を満たすGの解は，

$$G(x, y)=2\theta(x-y)[\eta_1(y)\xi_1(x)-\eta_1(x)\xi_1(y)] \tag{28-41}$$

である．Gを使うと，(28-40)式は（λfの項を摂動だとみなして）

$$\begin{aligned} f(x)&=\psi(x)-\lambda\int_0^L G(x, y)f(y)\,dy \\ &=\psi(x)-\lambda\int_0^x G(x, y)f(y)\,dy \end{aligned} \tag{28-42}$$

と書かれる．ここで，ψは$H\psi=0$を満たす関数である．探しているのは，(28-42)式を満たし，かつ，$f(0)=0$および$f(L)=0$となるfが存在するようなλの値である．これから，$\psi(0)=0$が要求される．しかも，興味があるのはλだけだから，ψの全体の規格化は，ここでは関係がなく，$\psi(0)$が指定できればよい．したがって，

$$\psi(x)=\eta_1(x)+c\xi_1(x) \tag{28-43}$$

ととると，

$$c=-\frac{\eta_1(0)}{\xi_1(0)}=-\left(\frac{N}{N'}\right)e^{-\kappa L} \tag{28-44}$$

となる．(28-42)式によって，λの最低次のオーダーで，fはψに一致する．よって，項Gfのなかで，fをψで置きかえる．これは，1次のボルン近似に似ている．(28-42)式で$x=L$とおき，$f(L)=0$を適用すると，つぎの方程式

$$0=\eta_1(L)+c\xi_1(L)-\lambda\int_0^L 2[\eta_1(y)\xi_1(L)-\eta_1(L)\xi_1(y)][\eta_1(y)+c\xi_1(y)]\,dy \tag{28-45}$$

ができる．(28-45)式は，λが満たさなければならない条件になっている．少し計算をし，(28-37)式と(28-38)式を使うと，(28-45)式は

$$\lambda=\frac{\eta_1(L)}{\xi_1(L)\left[\int_0^L \eta_1^2(y)\,dy-c(\eta_1(L)/\xi_1(L))\int_0^L \xi_1^2(y)\,dy\right]} \tag{28-46}$$

になる．η_1の定義によって，分母の最初の積分は，1である．(28-38)式から，積分$\int\xi_1^2$は，$\exp(\kappa L)$のオーダーである．しかし，式$c\eta_1(L)/\xi_1(L)$は，$\exp(-2\kappa L)$のオーダー．したがって，分母の2番目の積分は，落としてしまうことができる．NとN'がわかっているから，(28-46)式は

$$\lambda=24\varepsilon e^{-\kappa L} \qquad (=\lambda_1) \tag{28-47}$$

となる．こうして最終的に，Aが得られて

$$A^2=\frac{(1/2\kappa)e^{\kappa L}24\varepsilon e^{-\kappa L}(-3\varepsilon)}{-1/\kappa}=36\varepsilon^2 \tag{28-48}$$

となった．

ノート

この章の基本的な文献は，

J. S. Langer, *Ann. Phys.* **41**, 108 (1967)

である．また，

H. A. Kramers, *Physica* **7**, 284 (1940)

J. Lothe and J. P. Hirth, *Phys. Rev.* **115**, 543 (1959)

R. Landauer and J. A. Swanson, *Phys. Rev.* **121**, 1668 (1961)

も見よ．近年，この分野の研究がかなりの量にのぼっている．文献をもれなくリストアップすることは不可能であるばかりではなく，以下に示す文献でさえ，それ以外の文献を探す手がかりになるかもしれない，という程度である，

S. Coleman, The Uses of Instantons, in *The Whys of Subnuclear Physics*, Erice 1977, A. Zichichi, Ed., Plenum, New York, 1979

M. Stone, *Phys. Rev. D* **14**, 3568 (1976)

S. Coleman, *Phys. Rev. D* **15**, 2929 (1977)

C. Callan and S. Coleman, *Phys. Rev. D* **16**, 1762 (1977)

M. Stone, *Phys. Lett.* **67B**, 186 (1977)

この章で展開した，解析接続とそれにともなう特異点を使って，摂動展開の高次の項［(28-1)式の“α”，つまりφ^4の係数，のべき級数］のふるまいを推定することができる．Bender, Wu, Banks, Brezin, Zinn-Justin, Lipatovなどの研究は，

J. C. Collins and D. E. Soper, *Ann. Phys.* **112**, 209 (1978)

に解説されており，引用文献もそこに見いだすことができる．インスタントンを量子色力学に適用することに対する批判が

A. Patrascioiu, “Farewell to Instantons,” lecture, 1979

A. Patrascioiu, *Phys. Rev.* **D19**, 3800 (1979)

にある．臨界液滴についての物理的描像は，他の統計力学の教科書同様

K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, New York, 1963

でも得られる．相転移の液滴モデルは，

M. E. Fisher, *Physics* **3**, 255 (1967)

に説明されている．Fisherのモデルを使ったSewellの研究は，

G. L. Sewell, *Ann. Phys.* **97**, 55 (1976)

にある．長距離力をもつ系が準安定性を示すことは，

O. Penrose and J. L. Lebowitz, *J. Stat. Phys.* 3, 211 (1971)

に示されている．パーコレーションにおける真性特異点は，

H. Kunz and B. Souillard, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 133 (1978); *J. Stat. Phys.* **19**, 77 (1978)

に議論されている．

イジングモデルの低温展開の係数の漸近的挙動は，よく調べられており，ある種の特異点が現われる強い証拠が示された．しかも，特異点は，液滴モデルで予測される形と矛盾しないことが見つかった．その文献は，

G. A. Baker, Jr, and D. Kim, Ising Model Phase Boundary, *J. Phys. A* **13**, *L* 103 (1980)

M. J. Lowe and D. J. Wallace, Instantons and the Ising Model Below T_c', *J. Phys. A* **13**, *L* 381 (1980)

である．準安定性のもう1つの側面，あるいは，少なくとも，解析接続のもう1つのやり方，については

C. M. Newman and L. S. Schulman, *J. Math. Phys.* **18**, 23 (1977)

R. J. McCraw and L. S. Schulman, *J. Stat. Phys.* **18**, 293 (1978)

を見よ．非調和振動子のエネルギーの解析性に関する厳密な研究は，

B. Simon, *Ann. Phys.* 58, 76 (1970)

が行なった．

29章　位相空間経路積分

ここに1つ困難な問題がある．本書では，ところどころで，数学的に正しいことが保証されていない領域まで踏みこんでやってきた．ただし，その場合にはいつも，証明はあとから出てくるだろうし，細部が正当化できないときには，そこに数学的なチャレンジが含まれているのだとの信念をもっていた．位相空間経路積分にかぎっては，そうはいかない．この方法では，古典力学で大きな力を発揮する形式的なトリック（すなわち，正準変換）が，単に，間違った答えを出してしまうのだ．これを避けるためには，普通は無視できる誤差項に注意をはらう必要がある．しかし，一方で，位相空間経路積分にはメリットもある（特に，ラグランジアン形式よりハミルトン形式のほうがつごうがよい物理系がたくさんある）．注意して使えば，物理的に有用な知見を得ることも可能である．

位相空間経路積分もトロッター公式から出発するが，1章と違うのは，“p”の積分を実行せずに残しておくことだけが異なる．つまり，

$$G(x,t;y)=\left\langle x\left|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)\right| y\right\rangle$$

$$=\lim_{N\to\infty}\left\langle x\left|\left[\exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar N}\right)\exp\left(-\frac{iVt}{\hbar N}\right)\right]^N\right| y\right\rangle \tag{29-1}$$

ただし，$H=p^2/2m+V$．(29-1)式，つまり，右辺の極限がプロパゲータだという主張は，トロッター公式そのものである．上の1組の演算子の間に，座標表示と運動量表示の単位（演算子としての1）の分解を，交互に挿入する．そうすると，

$$G(x,t;y)=\lim_{N\to\infty}\int dp_1dx_1dp_2dx_2\cdots dp_{N-1}dx_{N-1}dp_N\langle x|e^{p^2\varepsilon/2m}|p_N\rangle$$

$$\times\langle p_N|e^{V\varepsilon}|x_{N-1}\rangle\cdots\langle x_1|e^{p^2\varepsilon/2m}|p_1\rangle\langle p_1|e^{V\varepsilon}|y\rangle \tag{29-2}$$

となる．ここで，

$$\varepsilon=-\frac{it}{\hbar N}$$

で，また，$x_0=y$と$x_N=x$とする．例によって，(29-2)式の御利益は，

$$\left\langle x_i\left|\exp\left(\frac{p^2\varepsilon}{2m}\right)\right|p_i\right\rangle=\exp\left(\frac{p_i^2\varepsilon}{2m}\right)\langle x_i|p_i\rangle$$

$$\langle p_i|\exp(V\varepsilon)|x_{i-1}\rangle=\exp(V(x_{i-1})\varepsilon)\langle p_i|x_{i-1}\rangle \tag{29-3}$$

からくる．内積

$$\langle x|p\rangle=(2\pi\hbar)^{-1/2}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \tag{29-4}$$

は，デルタ関数規格化

$$\int dx\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle=\delta(p-p')$$

を与える．(29-3)式と(29-4)式を(29-2)式に代入すると，

$$G(x,t;y)=\lim_{N\to\infty}\int dp_1 dx_1\cdots dp_N(2\pi\hbar)^{-N}$$

$$\times\exp\left\{\varepsilon\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m}+V(x_{j-1})\right)+\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}p_j(x_j-x_{j-1})\right\} \tag{29-5}$$

と書き直される．εの定義を思いだすと，(29-5)式は

$$G(x,t;y)=\lim_{N\to\infty}\int dp_1 dx_1\cdots dp_N(2\pi\hbar)^{-N}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(p\frac{dx}{d\tau}-H\right)d\tau\right] \tag{29-6}$$

となる．ただし，指数関数のなかの積分は

$$\int_0^t\left(p\frac{dx}{d\tau}-H\right)d\tau\equiv\frac{t}{N}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\frac{(x_j-x_{j-1})}{t/N}-\frac{p_j^2}{2m}-V(x_{j-1})\right] \tag{29-7}$$

を表わす．1章と同じように，(29-6)式は，経路の和と解釈できる．積分変数から推して，位相空間のなかで経路の和をとっていることになる．しかも，指数関数のなかは位相空間座標で表わされた作用積分にほかならない．しかし，位相空間の1点が古典経路を決定するという事実にかかわって，$2N$個（N個ではなく）の変数が現われたということから，むずかしい点が出てくる．これには，2つの解釈がある．(1)粒子の軌跡は，時間$jt/N\leqslant\tau\leqslant(j+1)t/N$, $j=0, 1, \ldots, N-1$の間にx_jからx_{j+1}へと進むが，その間，運動量はp_{j+1}に保たれる．量xは，時間間隔が隣に移る際に連続であるのに対して，pのほうはジャンプする．ファインマン経路の微分が不連続であることを思えば，pがジャンプしても驚くほどのことではない．しかし，対照的に，力学変数の指定が多すぎるために，時間$\tau\in[jt/N, (j+1)t/N]$の間はこの経路は古典経路にはなっていない．(2)時間間隔$[0, t]$を$2N$個に分割すると考える($\Delta=t/(2N)$とせよ)．それぞれの区間の左側の端点でxかpを交互に変化させながら割りあてる．その区間で粒子は，端点で与えられた値，つまり1個のxと1個のpで(これらは時間によって指定される)，古典軌道上を走る．つまり，$x(0)=x_0=y$；$p(\Delta)=p_1$, $x(2\Delta)=x_1$, $p(3\Delta)=p_2$, …, $x(2j\Delta)=x_i$, $p((2j-1)\Delta)=p_j$, …作用積分は，pとxが端点の値で近似できるものと仮定して計算する．たとえば，区間

$2j\Delta \leqslant \tau \leqslant (2j+1)\Delta$ では，x の初期値は x_j で，p の最終値は p_{j+1} である．H を $p_{j+1}^2/2m+V(x_j)$ で近似する．項 $p(dx/d\tau)d\tau$ は，$p_{j+1}(x_j^{(+)}-x_j)$ で近似するが，ここで $x_j^{(+)}$ は，時刻$(2j+1)\Delta$ において古典経路で決まってくる x の最終値で，未知数である．同様にして，つぎの区間 $\tau\in[(2j+1)\Delta, (2j+2)\Delta]$ に対しても，作用積分は

$$p_{j+1}\left(x_{j+1}-x_{j+1}^{(-)}\right)-\left(\frac{p_{j+1}^2}{2m}+V(x_{j+1})\right)\Delta$$

で近似される．ただし，$x_{j+1}^{(-)}$ は p_{j+1} と x_{j+1} の間の古典経路によって決められる，時刻$(2j+1)\Delta$ での x の値（未知数）．こうして得られる作用積分は，$x_j^{(+)}$ と $x_{j+1}^{(-)}$ の差が無視できる範囲では，(29-5)式から(29-7)式の表式のそれに一致する．これは，(29-5)式から(29-7)式の表式が間違っているといってるのではない．むしろ，これらの数式に位相空間の描像をくっつけようとしても限界があることをいっているにすぎない．

(29-5)式で p_j の積分を実行すれば，ラグランジアン形式の経路積分がただちに復活できる．実際，1章ではそうやって導いたのである．

位相空間経路積分からの応用は，ほんの少しばかりが始まったばかりである．この理論の視座に立って，古典力学を深く理解することもできる．最初に，おおざっぱな停留位相の議論（$\hbar\to 0$ として）を(29-6)式にあてはめてみると，古典極限でハミルトンの正準方程式が得られる．また，(29-6)式に E に関してフーリエ変換を施すと，

$$G(E) \sim \int_0^\infty e^{iEt/\hbar}G(t)\,dt \sim \int_{\substack{\text{エネルギー}\\ E\text{の経路}}} dp_1\,dx_1\ldots dp_N \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right) \tag{29-8}$$

が得られる．上の最後の部分は，(29-6)式の経路和を，H が固定されてフーリエ変換が本質的にデルタ関数になるように分割すると出る．(29-8)式は，半古典論での主要な寄与は，与えられたエネルギー E で $\int p\,dx$ が停留値をもつような経路からくることを意味（示唆？）している．もちろん，これも古典力学にいくつかある変分原理の1つの表現である．

私自身が好きな(29-6)式の応用は，結果においては，残念ながら誤っている．しかし，あとで出てくる間違った定理の結論というのは，正しいと思っていない場合でも正しかったりするので，いずれにせよ，お見せすることにしよう．

$H=0$ としよう．すると，(29-5)式の p_j の積分が，それぞれの x の値に対してデルタ関数を与え，そのうえ，x の積分が自明だから，結局

$$G(x,t;y)=\delta(x-y) \tag{29-9}$$

となる．これは，驚くような結果ではない．この場合プロパゲータは，単に，単位(つまり，1の) 演算子だからである．

ハミルトン力学の威力は，位相空間上での変数変換ができることにある．ある時間の新しい変数PとXを，古い変数（pとx）の組みあわせと時間を使って定義する．このような正準変換は，たとえば，関数$F(x, P, t)$で定義できて，

$$p=\frac{\partial F}{\partial x} \tag{29-10a}$$

$$X=\frac{\partial F}{\partial P} \tag{29-10b}$$

の性質をもつ．Fが特異でない適当な関数であれば，これは1：1の変換を位相空間に引き起こす．新しい運動方程式も正準形［つまり，$dX/dt=\partial H'/\partial P$など］であって，新しいハミルトニアンは

$$H'=H+\frac{\partial F}{\partial t} \tag{29-11}$$

で定義される．この変換がわれわれにとって非常に有用で中心的な役割を果たすのは，作用積分を計算するときである．経路$(x(\tau), p(\tau))$に対して，変換による作用積分の像は

$$\int_0^t\left(p\frac{dx}{d\tau}-H\right)d\tau=\int_0^t\left(P\frac{dX}{d\tau}-H'\right)d\tau \\ +F(x'', P'', t)-F(x', P', 0) \tag{29-12}$$

である．ただし，ここで，2個および1個のダッシュは，それぞれ最終と最初の値を指定している．(29-12)式の積分は，なめらかな経路上でのリーマン積分である．正準変換のもう1つの性質は，変換のヤコビアンが1であること，つまり

$$\frac{\partial(P, X)}{\partial(p, x)}=1 \tag{29-13}$$

である．

新しいハミルトニアンがゼロになってしまうような特別な変換がある．(29-10a)式を(29-1)式に代入すると，ハミルトン - ヤコビ方程式

$$H\left(x, \frac{\partial F}{\partial x}, t\right)+\frac{\partial F}{\partial t}=0 \tag{29-14}$$

が得られる．$H'=0$である以上，新しい変数XとPは，運動の定数になるはずだ．

経路積分に戻って，形式論をやってみよう．(29-6)式の和に寄与するある経路$(x(\tau), p(\tau))$に対して，ハミルトン - ヤコビ変換で定義される座標系のなかで，それに対応する経路$(X(\tau), P(\tau))$がある．もし，Fが正準変換の母関数ならば，

(29-12) 式によって

$$\int (p\,dx - H\,d\tau) = \int P\,dX + F(x'', P'', t) - F(x', P', 0) \qquad (29\text{-}15)$$

である．ここでこの変換が(29-15) 式の右辺からハミルトニアンを消去していることに注意せよ．この右辺では，F は端点のみに依存しているから，軌道そのものに依存しているのは，$\int P\,dX$ だけである．こうして，一般的な場合がゼロ - ハミルトニアンの場合に帰着されたように見える．しかしヤコビアンの計算がまだ残っている．というのは，(29-6) 式の経路積分には積分変数として $dp_1 dx_1 \ldots dp_N$ がある一方で，われわれは P と X を使いたいと思っているからだ．しかし，(29-13) 式から示唆されるように，ほとんどの変数変換のヤコビアンは1になる．積分変数の数を数えてみると，$(N-1)$ 個の x と，N 個の p がある．もし同じ数の X と P が積分にあるならば，1個の変換 $p \to P$ があって，そのヤコビアンを含めておく必要があるだろう．その変換がどのようなものかを知れば，いまよりも注意深く進まなければならないことがわかってくる．加えて，P と X の汎関数積分から X の関数が出てくるが，一方，もともとのプロパゲータは x を含んでいるから，$X \to x$ のヤコビアンも積分の両端で必要になってくる．これら全部のヤコビアンは，F のさまざまな2階微分である $\partial X/\partial x$ か $\partial P/\partial p$ の形の項を含む．細かいことには触れないが，これらのファクターから最終的にヴァン・ヴレック行列式 $[\det \partial^2 S/\partial x''_\alpha \partial x'_\beta]^{1/2}$ がでてきても，あやしむには足りない．ここで，S は F とする．

ヤコビアンを無視しても構わないというある程度の理由づけが済んだから，われわれはプロパゲータをつぎの形

$$G = \int dP(\tau)\,dX(\tau) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int P\,dX + F(x, P'', t) - F(y, P', 0) \right] \qquad (29\text{-}16)$$

にもってきたことになる．

ここで，一般化された運動量を選択する自由度があり，そのうちの1つで便利なのは，P を粒子の初期位置に選ぶことである．つまり，運動方程式の下で P は定数であって，その定数として（この定数が事実上軌道をラベルする），初期位置 y をとろうというのである．こうすれば，$F(x, P, t)$ は単に $S(x, y, t)$，つまり古典軌道に沿った作用積分になる．これは両端点の関数になっているだけだから，汎関数積分の外へ出せる．時刻ゼロでの作用積分はゼロ，つまり $F(x, P, 0)$ はゼロ．残りの汎関数積分は自明であり，ゼロ - ハミルトニアンの結果として $X'' - X'$ のデルタ関数が得られる．ただし，これら始点と終点は新しい座標で表わされている．新しい座標 X も運動の定数だから，このデルタ関数は，系が古典経路に沿って運動してきたことをいっている．こうして，プロパゲータは

$$G=e^{iS(x,y,t)/\hbar} \tag{29-17}$$

になる，ここでSはyからxにいたる古典経路である．(29-17)式で，$X''-X'$に関するデルタ関数は，xとyに逆変換した結果としてなくなっている．また，種々のヤコビアンから出てきたヴァン・ヴレック行列式は無視した．与えられた両端を結ぶ経路が複数個ある場合には，それらの項の和になるはずである．

(29-17)式が，13章でラグランジュ形式の経路積分から導いた半古典近似に対応しているのは明らかだ．

以上の定式化は，あまりにきちんとしていて，どこで間違いを犯したのか，なぜ万能の正準変換が$\hbar$の最低次でしか有効でなかったのか，わからないぐらいである．事実，上の"証明"のなかにはいくつも弱点が含まれている．そのうちのいくつかは，一般的または特殊な状況の下で修復可能なので，コメントしておこう．

最初に，われわれが上で定義した位相空間での経路というものが不連続であって，座標空間の経路積分の経路では，微分だけが不連続なのとは対照的であることに注意しよう．この効果がどこに入ってくるか，(29-15)式をもう一度考えてみよう．この式は，あたかも，連続な経路が$(x(0),\,p(0))$から$(x(t),\,p(t))$に通じているかのように書かれている．実際はそうではなく，その経路は，時間tに，運動量p_{i+1}でx_iからx_{i+1}に進み，つぎに，（一般には別の）運動量p_{i+2}でx_{i+1}からx_{i+2}へと進む．それぞれの短時間の経路に対して，正準変換を施して

$$p_2(x_2-x_1)=\int P\,dX+F\big(x_2,P_2^{(+)},\Delta t\big)-F\big(x_1,P_2^{(-)},0\big)$$

$$p_3(x_3-x_2)=\int P\,dX+F\big(x_3,P_3^{(+)},2\Delta t\big)-F\big(x_2,P_3^{(-)},\Delta t\big) \tag{29-18}$$

$(i=1,2)$とできる．$P_i^{(\pm)}$は両端における正準運動量の値であるが，軌道がかならずしも古典経路とはかぎらないことから，$P_{i-1}^{(+)}$は$P_i^{(-)}$と同じ値である必要はない．そこで，(29-18)式のような項をすべてのiについてつぎつぎと足しあわせて，中間に現われるFを打ち消しあわせたい．たとえば，$F(x_2,P_2^{(+)},\Delta t)$を$F(x_2,P_3^{(-)},\Delta t)$とキャンセルさせたい．そうすれば，(29-15)式で残ってくるのは，両端でのFになるだけになるはずだ．しかし，Pの値の不連続性のため，(29-15)式で$P_3^{(-)}$と$P_2^{(+)}$が同じでないかもしれないから，よぶんに

$$\sum_i \frac{\partial F}{\partial P}\big(P_{i-1}^{(+)}-P_i^{(-)}\big)$$

が残ってくる．古典経路ならば，この項は当然ゼロであり，粒子が古典経路に近づく程度によっては，この項は無視できる．しかし，$\hbar$の高い補正項では，Pの差が

ラグランジアンにおける速度のジャンプに関係している以上，その値は小さくなく，この補正が無視できる理由はなにもない．

位相空間における不連続な経路が，通常，位相空間経路積分で考える経路である．しかし，連続経路を考えたらという示唆も以前からある．そこで今度は「証明」のもう1つの問題を考えてみることにする．

母関数Fは，位相空間での座標変換を引き起こす．しかし，大域的に定義された一意的な変換を与える1個だけのFが，本当にあるかどうかは考えてこなかった．ここまでの解析では，そういう変換があることをずっと仮定していたのだけれども．実際，（位相空間の）変換は多価であると信じる理由がいたるところにある．それは，与えられた2つの端点を結ぶ古典経路が2つ以上あった場合，異なったハミルトン - ヤコビ関数（したがって正準変換の母関数）が，それぞれの経路に$S=\int L\,dt$の形で存在するからだ．しかも，これらは互いに関係づけられる．というのは，焦点（共役点）では異なった経路が合流し，その点でハミルトン - ヤコビの変換関数が分岐点をもつと期待されるからだ（24章のノートを見よ）．(29-17)式がいくつもの項をもつように拡張する際に，この領域で面倒なことが起きるのは明らかだ．

(29-17)式の証明を行なうようにみえて，実はその誤りの解析ばかりを行ない，たくさんの問題点をもちだしてくるのを，読者はちょっと奇妙に感じるかもしれない．われわれの目的は，理論の中身を探検することと，教訓的な意味をひろいだすことだった．探検というのは，古典経路の和が厳密に正しい場合がいくつもあって（6章の付録参照），位相空間経路積分がそれに対する知見を与えてくれるかもしれない，との意味においてのことである．教訓のほうは，形式的に位相空間経路積分を使って間違った結論を導いている研究の内容を検討することによって，何年も理解されていない事実を世に知らしめることである．

楽観的に，不連続経路にともなう困難が解決したと想像してみよう．すると，大域的な変換を定義できさえすればうまくふるまうような，特別な系をさがすことができるかもしれない．たとえば，ソリトンをもつn変数の系は，n個の大域的な不変量をともなっていることが知られている．そのような，系の量子論的プロパゲータが古典経路だけで記述されるだろうか？これに関連した主張が，過去になされてはいる．しかし，その厳密な意味，その主張の正当性，またここで述べた方法との関連（関連があるとしても）には，私は確信がもてない．

位相空間経路積分の落し穴を示す1例として，運動量と位置の任意の関数$f(p, x)$を考える．通常の量子化法では，fに対応する演算子はなにかということにあいまいさがある．読者は，(29-6)式の指数関数に乗っている変数の部分に，$f(p, x)$を代入して積分してやりさえすれば，演算子の一意的な順序づけのルールができる，と考

えられるかもしれない．しかし，そうはいかない．位相空間経路積分特有の微妙な点があるおかげで，ラグランジアン形式の経路積分より，あいまいさが少なくなるということはない（8，24，27章参照）．演算子の順序づけの問題は，フォッカー - プランク方程式のための実関数値汎関数積分（$e^{iS/\hbar}$をともなう経路積分ではなくて）に関連して，最近また新たな興味がもたれている．

位相空間経路積分は，つぎに2つの要素があるときに，もっとも意味のある応用が可能である．(1)なにかの理由で，ラグランジアンではなく，ハミルトニアンの形式にかかわっているとき．(2)半古典論の結果が十分正しいとき．その例は，以下のノートにあげておく．

ノート

位相空間経路積分は，1951年に発見されて以来，何度も再発見された経緯がある．文献としては，つぎのものがある．

R. P. Feynman, An Operator Calculus Having Applications in Quantum Electrodynamics, *Phys. Rev.* **84**, 108 (1951), Appendix B

W. Tobocman, Transition Amplitudes as Sums over Histories, *Nuovo Cim.* **3**, 1213 (1956)

H. Davies, Hamiltonian Approach to the Method of Summation over Feynman Histories, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **59**, 147 (1963)

C. Garrod, Hamiltonian Path-Integral Methods, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 483 (1966)

もっと抽象的な形式の位相空間経路積分も発展していて，そこでは，(29-5)式でやったように経路を分解するという方法をとらない．これは，泥沼化した端点$x_i^{(\pm)}$の問題や，(29-5)式，(29-6)式にまつわるエレガントとはいえそうもない複雑な処理法を回避するには，よい方法かもしれない．この形式の経路積分は，

C. DeWitt-Morette, A. Maheshwari, and B. Nelson, Path Integration in Phase Space, *Gen. Rel. and Grav.* **8**, 581 (1977)

M. M. Mizrahi, Phase Space Path Integrals, without Limiting Procedure, *J. Math. Phys.* **19**, 298 (1978)

にある．厳密性や教育的な配慮まで広くカバーした，別の定義や表現法は

K. Gawedzki, Construction of Quantum-mechanical Dynamics by Means of Path Integrals in Phase Space, *Rep. Math. Phys.* **6**, 327 (1974)

に見られるが，そこでは，伊藤が通常の経路積分で用いたテクニックに似たものが使われている．つぎに，

A. L. Alimov, Hamiltonian Form of a Feynman Path Integral, *Theor. and Math. Phys.* **20**, 837 (1975)[trans. from *Teor. Mat. Fizika* **20**, 302 (1974)]

P. Pearle,Finite-Dimensional Path Summation Formulation for Quantum Mechanics, *Phys. Rev. D* **8**, 2503 (1973)

M. Clutton-Brock, Feynman's Kernel and the Classical Path, *Camb. Phil. Soc.* **61**, 201 (1965)

R. Fanelli, Canonical Transformations and Phase Space Path Integrals, *J. Math. Phys.* **17**, 490 (1976)

をあげておこう．Fanelli は，量子論のユニタリー変換から出発して正準変換を求めた．この手続きは，その逆の順序より，一般的に理論として安全である．彼は，演算子の順序の不確定さが，問題を複雑にする場合があることを指摘している．また，順序づけの方法の限界にも議論がおよんでいる．位相空間経路積分では，p と q を異なった時間で定義する必要があることは，

A. Katz, *Classical Mechanics, Quantum Mechanics, Field Theory*, Academic Press, New York, 1965

で議論された．演算子の順序づけのあいまいさは，

L. Cohen, Hamiltonian Operators via Feynman Path Integrals, *J. Math. Phys.* **11**, 3296 (1970)

でも強調されていて，種々の例が出ている．手短かで要点をついた総合報告が，

J. S. Dowker, Path Integrals and Ordering Rules, *J. Math. Phys.* **17**, 1873 (19

に与えられている．この問題に関しては，

L. van Hove, Sur le Probleme des Relations entre les Transformations Unitaries de la Mecanique et les Transformations Canoniques de la Mecanique Classique, *Mem. Acad. Roy. Belg.* **26**, 610 (1951)

に基本的なアイデアを発見できる．Van Hove は，量子論のユニタリー変換と古典論の正準変換を関係づけることを考え，母関数がたかだか2次までの場合にかぎり，2つの連続変換の間に1対1の対応があることを見いだした．これは，半古典論のプロパゲータが2次までのラグランジアンに対して厳密になることから，位相空間経路積分の正準変換が半古典論のプロパゲータを再現することの根拠を与える．一方で，それより一般的な場合には，変換がうまくいかないことの理由にもなっている．

フォッカー - プランク方程式の汎関数積分解に関して，演算子の順序づけが最近の興味を引いている．座標表示と位相空間表示の両方ともが使われており，量子化をせず，汎関数積分によって順序のあいまいさを解決する試みがなされている．たとえば，

R. Graham, Lagrangian for Diffusion in Curved Phase Space, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 51 (1977)

H. Dekker, Functional Integration and the Onsager-Machlup Lagrangian for Continuous Markov Processes in Riemannian Geometries, *Phys. Rev. A* **19**, 2102 (1979)

F. Langouche, D. Roekaerts, and E. Tirapegui, Perturbation Expansions through Functional Integrals for Nonlinear Systems, *Phys. Rev. D* **20**, 433 (1979)

F. Langouche, D. Roekaerts, and E. Tirapegui, Discretization Problems of Functional Integrals in Phase Space, *Phys. Rev. D* **20**, 419 (1979)

A. C. Hirshfeld, Canonical and Covariant Path Integrals, *Phys. Lett.* **67A**, 5 (1978)

単行本では，

L. Garrido, R. Segular, and P. J. Shepherd, Eds., *Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems*, Proceedings Sitges International School of Statistical Mechanics, Barcelona, Springer Verlag, Berlin 1978

がある．場の量子論における演算子の順序と，位相空間での処理，正準変換，経路積分量子化，どれをやってもあいまいさが残るということは

H. Leschke, A. C. Hirshfeld, and T. Suzuki, Dyson-Wick Expansion for Nonlinear Bose Systems, *Phys. Lett.* **67A**, 87 (1978)

に議論されている．ソリトンとその性質は，

A. C. Scott, F. Y. F. Chu, and D. W. McLaughlin, The Soliton : A New Concept in Applied Science, *Proc. IEEE* **61**, 1443 (1973)

に総説がある．完全可積分性，大域的な不変量，およびそれらに関連した問題は

V. I. Arnold and A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics*, Benjamin New York, 1968

で議論されている．ソリトンを含む系では，WKBの半古典近似が厳密解になる可能性は

R. F. Dashen, B. Hasslacher, and A. Neveu, Particle Spectrum in Model Field Theories from Semiclassical Functional Integral Techniques, *Phys. Rev. D* **11**, 3424 (1975)

が見いだした．彼らはおもに，Gutzwillerが発展させた方法（以下の文献と18章を参照）を用いた．この厳密性については，S. Colemanによる場の量子論の結果と比較するなかで気がついたようだ（しかし，摂動論のすべてのオーダーで一致したということは，両者が等価であるということと同じではないことが指摘された．

漸近級数では本質的に特異点が残っている可能性があるからであるWKBの文脈のなかでは，障壁への透過の寄与がちょうどその形をしている可能性がある）．ソリトンの量子化にとって，汎関数積分は，主要な方法論の1つになっていて，実際，素粒子論の専門家が興味をもつようなインスタントンの計算（28章で行なった）の理論的背景をなしている．この分野の多くの研究は，つぎの研究会報告

J. L. Gervais and A. Neveu, Extended Systems in Field Theory, *Phys. Rep.* **23**, 237 (1976)

に見ることができる．汎関数積分についてはGervais, Neveu, A. Jevicki, 崎田,等が報告している．このうち，何人かの論文では，系の対称性から生ずるゼロモードの問題を扱っている（これは，並進対称性から出てくるモードである，28章参照）．これについての，より最近の研究は

L. D. Fadeev and V. E. Korepin, *Phys. Lett.* **63*B***, 435 (1976)

S. S. Chang, *Phys. Rev. D* **17**, 2595 (1978)

を，また，

L. D. Fadeev and V. E. Korepin, Quantum Theory of Solitons, *Phys. Rep.* **42**, 1 (1978)

も見よ．位相空間経路積分は，多くの人に効果的に使われている．たとえば，

M. C. Gutzwiller, Phase-Integral Appoximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom, *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967)

これは，球対称性および非球対称性のポテンシャルに対する半古典近似を求める一連の論文の第1報である．Gutzwillerは，これらの研究を通して，古典力学の微妙な性質を調べている．この応用としては，運動量空間のプロパゲータを求めるために，位相空間積分をその前の踏台に使っている．空間座標はフーリエ変換によって消去される．スピンのための位相空間形式は，

Peter Horvathy, *Feynman Integral for Spin*, CNRS preprint, April 1979

が与えた．そこでは，上で述べたGawedzkiの位相空間経路積分が使われている．

位相空間経路積分を使うことが本質になっている応用としては

S. Levit, U. Smilansky, and D. Pelte, A New Semiclassical Theory for Multiple Coulomb Excitation, *Phys. Lett.* **53B**, 39 (1974)

S. Levit and U. Smilansky, The Hamiltonian Path Integrals and the Uniform Semiclassical Approximations for the Propagator, *Ann. Phys.* **108**, 165 (1977)

S Levit, K. Möhring, U. Smilansky, and T. Dreyfus, Focal Points and the Phase of the Semiclassical Propagator, *Ann. Phys.* **114**, 223 (1978)

がある．Levit らの研究対象では，境界値問題を定義するのに座標表示は最適では

なく，必然的に，位相空間経路積分を使っている（19章参照）．実際には，しかし，彼らの主たる興味は半古典論にあって，位相空間経路積分を使っても無傷で帰ってくることができた．コースティクスの研究では，最低次の半古典近似を超える必要があるわけだが，最低次に留まるかぎりなにも問題は起きない．

場の量子論の方法を表わすのに，あるものに対しては，位相空間経路積分が便利であることがわかっている（通常のラグランジアン形式の経路積分と同じように）．たとえば，

E. S. Abers and B. W. Lee, Gauge Theories, *Phys. Rep.* **9**, 1 (1973)

を見よ．この論文は，ゲージ場理論のくりこみに，経路積分を使うことの美しい理論的背景が書かれている．経路積分を使っているある種の人，たとえば，審美眼に欠けている素粒子物理学者（そういう人がいるとしての話だが）にとっては，この応用例は，経路積分の完全な存在理由になっている．ただ，不幸にして，私には，経路積分を経由してくりこみを扱う価値がある大規模な例を，本書のなかでは見いだせなかった．Abers と Lee の本のほかに，さらに読み進むとしたら，私は

D. J. Amit, *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena*, McGraw-Hill, New York, 1978

を勧めたい．上に掲げたソリトンの量子化に関する参考文献も参照せよ．

27章で述べたように，位相空間経路積分とコヒーレント状態経路積分は互いに深く関連している．27章のノートとその文献を見よ．

30章　補遺，各論，および私的見解

最後のこの章は，ここまででカバーできなかった多くの話題のうち，いくつかをすばやく見ていくことにしたい．議論は手短かに行ない，単に参考文献をあげるだけの節もある．

30.1　場の理論

経路積分と汎関数積分の主な応用分野は，場の理論である．これは，足しあわされる対象が，1個以上の連続パラメータに依存するという点で，いままで考えてきたものとは違っている．経路積分では，$t=0$ と T でなんらかの境界条件をつけて，「すべての」関数 $x(t)\,(0\leqslant t\leqslant T)$ からの寄与を足しあわせた．場の理論では，「すべての」場 $\varphi(\mathbf{r},t)$ について（$\mathbf{r}$ と t を変えながら），和をとりたい．同じように，1次元系の統計力学は，しばしば，ウイーナー積分という形で与えられるが，多次元の汎関数積分では，多変数の独立な連続パラメータが必要である．

はじめに，場の経路積分でなにをしたいか形式的に述べておく．そのあとで，いくつか問題点を指摘し，最後に経路積分で達成できた成果に言及することにする．

古典場 $\varphi(\mathbf{r})$ があると仮定し，それを量子力学へ直接一般化しようと思うと，それに対応する基本的な量は，波動関数 $\Psi(\varphi(\mathbf{r}),t)$，すなわち，時刻 t で場が値 $\varphi(\mathbf{r})$ をもつ確率振幅，ということになるだろう．古典場の動力学が作用 S の変分原理から得られるものとする．すなわち

$$S=\int dt\int d^3x\,\mathfrak{L}(\varphi,\dot{\varphi}) \tag{30-1}$$

$$\mathfrak{L}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2-\frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2-\frac{1}{2}m^2\varphi^2-P(\varphi) \tag{30-2}$$

ここで，m は定数．P は，たとえば $\lambda\varphi^4$ のような，φ のある関数．古典場は，オイラー - ラグランジュ方程式

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}-\nabla^2\varphi+m^2\varphi+\frac{\partial P}{\partial\varphi}=0 \tag{30-3}$$

を満たす．一方，量子状態は，つぎのプロパゲータ

$$G[\varphi''(\cdot), t''; \varphi'(\cdot), t'] = \int \prod_{\mathbf{r}\tau} d\varphi(\mathbf{r}, \tau) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau \int d^3x \mathfrak{L}(\varphi, \dot{\varphi})\right] \quad (30\text{-}4)$$

でもって時間発展する．記号$\Pi_{\mathbf{r},\tau}$は，場の「配置」についての和をとることを表わす．時刻t'で配置$\varphi'(\mathbf{r})$をとり，t''で$\varphi''(\mathbf{r})$となる場についてとる．Gが，$\Psi(\varphi, t)$を，線形微分方程式を満たすように，時間発展させる．この方程式，シュレーディンガー方程式に対応する方程式，には汎関数微分$\delta^2/\delta\varphi(\mathbf{r}_1)\delta\varphi(\mathbf{r}_2)$が含まれる．相対論的不変性をとりこむことは，空間的時空について考えるなら，そんなにむずかしいことではない．しかし，ここで，読者を悩ますことはやめておこう．

形式的には，Gから出発すれば，なんでもできる．波動方程式，交換関係，真空の期待値，摂動展開を導くこと，鞍点法の応用，など．これについては，体系的に述べない（手短かに文献が与えてある）．ただ，相転移におけるランダウ理論につながる形式的な対象を考える際の，有用性と弱点についてだけ触れておく．出発点は，秩序パラメータ$\varphi(\mathbf{r})$をもつ系の分配関数である．この系は，与えられた配置（すなわち，秩序パラメータの空間依存性）に対して，エネルギー

$$H = \int_\Omega d^3x \left[(\nabla\varphi)^2 + \varepsilon\varphi^2 + \varphi^4\right] \quad (30\text{-}5)$$

をもつ．ただし，Ωは，系の体積．ランダウ理論によれば，系の自由エネルギーは，φによって最小化されるHの値である．$\varepsilon<0$では，系はゼロではないφの状態にいく．$\varepsilon=0$が臨界点．より正確な統計力学的なとり扱いだと，φのゆらぎを考慮し，分配関数として，汎関数

$$Z = \int d\varphi(\cdot) \exp(-\beta H) \quad (30\text{-}6)$$

を与える．ここでの記号は(30-4)式と少し違っている．φのなかのドットは，ダミーの3次元ベクトル$(\mathbf{r})$に対するものである．βは温度の逆数である．和は，すべての場の配置についてとる．単位体積当たりの自由エネルギーは，$\Omega\to\infty$の極限では

$$F = \left(-\frac{1}{\beta\Omega}\right) \log Z \quad (30\text{-}7)$$

である．大きなΩに対してはHも大きいから，(30-6)式に対してラプラス法が使えると考えるだろう．つまり，Zは，主にHを最小にするφからの寄与で与えられる．すると，$Z \sim \exp(-\beta H(\varphi_{\min}))$，したがって$F \sim (1/\Omega) H(\varphi_{\min})$．これがランダウ理論である．臨界点近くでは，$Z$はラプラス法でうまく近似することはできないことがわかっている．この理由で，くりこみやスケーリングの理論が登場してきたのだった．

(30-4)式または(30-6)式が基本的に，経路積分やウイーナー積分よりやっかいな

のはどうしてなのか，を考えよう．ν次元の空間では，

$$G=\int d\varphi(\cdot)\exp\left\{-\int d^{\nu}x\left[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\nu}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right)^2+\frac{1}{2}m^2\varphi^2+P(\varphi)\right]\right\} \tag{30-8}$$

となる．(30-8)式は，いわゆる「ユークリッド化」，すなわち虚数時間へ移行することによって，(30-4)式から得られる．ただし，物理的な時空上での場の論では，$\nu=4$．物理的空間や，分配関数の計算では，$\nu=3$である．普通の量子力学やウイーナー積分では，$\nu=1$である．ここで使った記号には，Gについての境界条件が，（あったとしても）指定されていない．汎関数積分がφのフーリエ成分上で行なわれるようにするために，フーリエ変換を行なう．すなわち，

$$G=\int\prod_k d\tilde{\varphi}(k)\exp\left\{-\int d^{\nu}k\left[\frac{1}{2}(k^2+m^2)\tilde{\varphi}(k)\tilde{\varphi}(-k)\right]-Q(\tilde{\varphi}(k))\right\} \tag{30-9}$$

ここで，Qは，$\tilde{\varphi}(k)$の汎関数で

$$Q(\tilde{\varphi}(k))=\int d^{\nu}xP\left(\int e^{ikx}\tilde{\varphi}(k)\,d^{\nu}k\right) \tag{30-10}$$

で与えられる．(30-9)式のk^2は$\sum_{i=1}^{\nu}k_i^2$のことで，もちろん，運動エネルギー（統計力学では，最近接カップリング）を表わす．

(30-8)式と(30-9)式を使って，ウイーナー積分，つまり$\nu=1$，にかかわる事実を復習しておこう．ウイーナー積分では，和をとる（ほとんどすべての）経路は連続であるが，いたるところ微分不可能である．後者の性質は，くり返し強調してきた．そもそもこの性質は，

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{t/N}\right]=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}\right) \tag{30-11}$$

の項から現われた．与えられたΔtに対して，経路積分を実行するときに重要になるxの幅は，

$$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}=\mathrm{O}(1) \tag{30-12}$$

である．したがって，和に効いてくる経路は，$\Delta t\to 0$で無限大になる微分

$$\text{微分}\sim\frac{\Delta x}{\Delta t}=\mathrm{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\Delta t}}\right) \tag{30-13}$$

で特徴づけられる（実際，漸近近似のところで見たように，$(\Delta x)^2/\Delta t$は対数的に大きくなる．しかし，べきを勘定する目的には，これを無視して差しつかえない）．

同様の論理から，(30-9)式で，$\tilde{\varphi}(k)$が大きなk依存性をもつことを示すことができる（もちろん，大きなkというのは，無限大の微分とか不連続性の問題が表に現われてくるところである）．(30-9)式から，それぞれのモードkに対して，

$$|\tilde{\varphi}(k)| = \mathrm{O}\left(\frac{1}{k}\right) \tag{30-14}$$

となることが期待される．$\nu=1$ に対しては，経路は連続だということが別の理由からわかっている．もし，(30-14) 式に基づいておおざっぱな議論をするだけでそれが出てくるなら，結構なことだ．残念なことに，(30-14) 式は連続性を確立するには100パーセント十分とはいえない．しかし，おおよそのところは大丈夫で，なおかつ，$\nu>1$ についても発見法的に見ておくということに対して，意味がある．

フーリエ係数の漸近的性質，たとえば関係式(30-14)式を，変換された関数の性質に関係づけることは，フーリエ解析から派生するの大きな科学につながっていく．そのようななかの定理の1つが，つぎのものである．

定理：　$f(x)$ が，ある次数 $\alpha(0<\alpha\leqslant 1)$ のリプシッツ条件を満たすとする．すなわち，$h\to 0$ で

$$f(x+h)-f(x)=\mathrm{O}(|h|^{\alpha})$$

が，x について一様に成立するとする．このとき，

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos nx\,dx = \mathrm{O}(n^{-\alpha})$$

$$b_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin nx\,dx = \mathrm{O}(n^{-\alpha}) \qquad n\to\infty$$

がなりたつ．もう1つこの種の結果として，有界変動の関数については，a_n と b_n はともに $\mathrm{O}(1/n)$ である．

われわれが利用したい性質は，もし，ある $\alpha>0$ に対して，$\tilde{\varphi}(k)=\mathrm{O}(k^{-1-\alpha})$ ならば，$\varphi(x)$ は連続である，というものがある．これは，

$$\varphi(x+\delta)-\varphi(x)=\int dk\left[\tilde{\varphi}(k)k^{1+\alpha}\right]\frac{1}{k^{\alpha}}\left[\frac{e^{ik\delta}-1}{k}\right]e^{ikx} \tag{30-15}$$

を計算すれば確かめられる．(30-15) 式のなかの差は，$\tilde{\varphi}(k)$ がゼロ近傍でおとなしいふるまいをするとすると（たとえば，$\int_0^{k'} k|\tilde{\varphi}(k)|dk$ が，ある k' に対して有限だと仮定すればよい），δ を調節すればいくらでも小さくすることができる．これは，(30-14) 式の関数については，ちょっと「こすって」やれば，連続にできることを意味する（フーリエ変換では，k を掛けるということは，微分をとることに対応し，割り算は積分に対応することを思いだせ）．実際，ウイーナー経路が連続であることは，われわれはわかっている．しかし，ここでは，フーリエ係数を見ればどの程度のことが得られるのかをわかるようにするのが目的である．

さて，$\nu>1$ の汎関数積分を考える．(30-9) 式の指数関数には，依然として

$k^2|\tilde{\varphi}^2(k)|^2$ が含まれているから，

$$|\tilde{\varphi}(k)|=\mathrm{O}\left(\frac{1}{\left(\Sigma k_i^2\right)^{1/2}}\right) \tag{30-16}$$

となる．2次元では，場は

$$\varphi(x_1, x_2)=\int dk_1 dk_2 e^{i(k_1x_1+k_2x_2)}\tilde{\varphi}(k_1, k_2)$$
$$=\int dk_1 e^{ik_1x_1}\psi(k_1, x_2)$$

のように見えるが，この式で $\psi(k_1, x_2)$ を定義する．(30-16)式から，x_2 の関数としての $\psi(k_1, x_2)$ は，連続に近いとわかる．しかし，一度積分してしまったから，(30-16)式は，もはや $\varphi(x_1, x_2)$ については助けにならない．もし，$\tilde{\varphi}(k)=\mathrm{O}(\Pi k^{-1})$ であったのなら，（ほぼ）連続だといえたのだが．しかし，残念なことに，φ にはそのような性質がない．一方，φ の積分は，フーリエ変換したとき，分母によぶんな k のべきが入るだろう．結果として，φ の積分は「ほぼ」連続である．別のいい方をすると，もし，φ を，任意の $\alpha>0$ について，$1+\alpha$ 回（積分するとか平均するとかして）「こすって」やると連続になる，ということだ．ν 次元では，$\nu-1+\alpha$ 回積分してやらねばならない．

以上から，汎関数積分に入ってくる場は，非常にあらっぽくて，短波長問題としてブラウン運動よりもはるかに質が悪く，次元が上がるにつれ，ますます厳しい問題になってくることがわかる．これは，実際には，場の理論における通常の定式化にでてく紫外発散の反映である．そこでは，自由グリーン関数 $(\sum_i \partial^2/\partial x_i^2-m^2)^{-1}$ を計算すると，積分

$$\int \frac{d^\nu k}{k^2+m^2} \tag{30-17}$$

が現われるが，この発散は，$\nu\geqslant 2$ に対して，ますますひどくなる．

(30-17)式から，$\nu>1$ ではモードの数が多すぎて，減衰型の $1/k^2$ が埋めあわせをしきれなくなっているということがわかる．これから，また勇気を奮い起こして，このあらっぽい場をなんとかしようと思ったとしても，ラプラス法やその他，汎関数積分を有効な理論にしていた近似そのものがトラブルを起こしてしまうと予想される．14章で，ラプラス法が無限次元系，すなわちウイーナー積分に拡張できることを示した．そこでは，個々のモードを積分したときの誤差を計算し，全部足しあわせると $\hbar$ とともにゼロになることを見た．しかし，場のほうではモードがはるかに多く，しかも減衰が早いわけではないので，ラプラス法の有効性には疑問がある．

場のあらっぽさのせいで，$\nu\geqslant 2$ では困難が起きることは確かだが，それですべてを失ってしまうわけではなく，通常のとり扱いで現われる紫外発散をとり除く方法

が可能であると期待できる．本書では，この問題に立ちいるのは止めておく．しかし，場の理論の議論を終える前に，Feynmanが経路積分をもちこむことによって，どうやって，語るだにおそろしい問題がゴロゴロしている量子電磁気学（量子電気力学）に，大きな成果をあげたか，簡単に説明しておこう．

量子電磁気学は，電磁場と相互作用する物質の理論である．経路積分が有効なのは，電磁場が，無限個の調和振動子の集まりとして表現でき，物質との相互作用が振動子の線形力項で表現されることからきている．この系の経路積分は，閉じた形でわかっていて（6章），場の座標を完全に積分して消去できる．この手続きは，ポーラロンの問題でフォノン場を消去したのと厳密に同じである．

物質場を非相対論的にとり扱おう．それぞれの運動量に対して，電磁場は2つの自由度をもつ（横偏極）．物質場はいずれにせよ非相対論的なのだから，非共変的なゲージを採用しておくのが便利である．すると，$\phi=$（電磁場のベクトルポテンシャル第4成分）は，物質によってあらわな形で解くことができ，動力学的な変数として消去される．経路積分は，場と物質系の具体的な履歴に対する古典的作用積分があれば定式化することができる．この作用積分は，

$$S=S_{\mathrm{mat}}+S_{\mathrm{rad}}+S_{\mathrm{int}} \quad \text{（下付き添え字は，それぞれ，物質，輻射場，相互作用）} \tag{30-18}$$

$$S_{\mathrm{mat}}=\int dt\left[\sum_{i=1}^{n}\tfrac{1}{2}m_i(\dot{\mathbf{q}}_i)^2+\sum_{i,j}\frac{e_ie_j}{|\mathbf{q}_i(t)-\mathbf{q}_j(t)|}\right] \tag{30-19}$$

$$S_{\mathrm{rad}}=\tfrac{1}{2}\int dt\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\dot{a}^*_{1\mathbf{k}}\dot{a}_{1\mathbf{k}}-k^2a^*_{1\mathbf{k}}a_{1\mathbf{k}}+(1\leftrightarrow 2)\right] \tag{30-20}$$

$$S_{\mathrm{int}}=\sqrt{4\pi}\sum_j e_j\int dt\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(a_{1\mathbf{k}}\dot{q}_{1j}+a_{2\mathbf{k}}\dot{q}_{2j}\right)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_j) \tag{30-21}$$

である．粒子は，i, jでラベルされ，質量m_i，電荷e_iをもつ．$a_{1\mathbf{k}}$と$a_{2\mathbf{k}}$は，電磁場の3次元ベクトルポテンシャルのフーリエ成分であり，$\mathbf{k}$はモードの波数ベクトルである．ここでは，ゲージとして$\nabla\cdot\mathbf{A}=0$を使う．したがって，$a_{l\mathbf{k}}$, $l=1, 2$は，$\mathbf{k}$に垂直な2つの分極である．$\Sigma e_ie_j/|\mathbf{q}_i-\mathbf{q}_j|$の項は，解かれた4番目の成分から，瞬間的なクーロン相互作用として出てきたものである．S_{rad}をそれだけで考えると，自由振動子の集まりとしての場が記述される．この振動子の1個1個の励起が，適当な運動量と分極をもつ光子である．S_{int}は，本質的に$e\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}$のことである．後者は，電磁場を，力学変数としてではなく，外から与えられた場だと考える型の理論では，おなじみのものである．われわれのとり扱いが通常と違っているのは，$a_{l\mathbf{k}}$も経路積分の変数として入っているということである．$\dot{q}_{lj}(l=1, 2)$は，$a_{l\mathbf{k}}$の分極方向に

沿ってのj番目の粒子の速度である．(30-18)式から(30-21)式までの作用積分から，通常の変分原理によって，与えられた電磁場と相互作用する荷電粒子のための古典力学出てくる．

原理的に興味があるのは，(30-4)式のように，ある場-物質の配置から，別のそれへと移行するプロパゲータである．しかし，より一般的には電磁場は，最初と最後に存在している光子の数を指定することによって状態が特定される．また，ほしい物理量はGの行列要素である．たとえば，ラムシフトは，水素原子の準位の輻射場による補正で，ゼロ光子状態からゼロ光子状態への（すべてのkと両方の分極の）遷移と，特定の電子エネルギー順位の変化を調べたものである．光子の放出の確率振幅は，初期状態の光子の数がゼロで，たとえば水素原子が$2p$状態から出発するというようにして計算される．最終状態には光子1個と水素原子の基底状態が残る．

電磁場が真空で始まり，真空で終わり，かつ，物質のほうがある値の組q_i'からq_i''，$i=1, \ldots, n$へと遷移する確率振幅を考えよう．すなわち，

$$G(q'', \mathrm{vac}, t; q', \mathrm{vac}) = \int \prod_{l,\mathbf{k}} da''_{l\mathbf{k}} da'_{l\mathbf{k}} \,[\text{全ての}\, a'_{l\mathbf{k}} \,\text{と}\, a''_{l\mathbf{k}} \,\text{の調和振動子の基底波動関数}]$$
$$\times \int \prod_{l,\mathbf{k}} da_{l\mathbf{k}}(\cdot) \prod_i dq_i(\cdot) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[S_{\mathrm{mat}} + S_{\mathrm{rad}} + S_{\mathrm{int}} \right] \right\} \tag{30-22}$$

である．(30-20)式と(30-21)式の形をみると，それぞれの$a_{l\mathbf{k}}$に関する経路積分と普通の積分が，別々に実行できることがわかる．aについた$l_{\mathbf{k}}$を書かないことにして，これらの積分は，おのおの，

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} I_{l\mathbf{k}}\right) = \int da'\, da'' \left(\frac{k}{4\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{k}{2\hbar}(a''^2 + a'^2) \right] \int da(\cdot)$$
$$\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int \tfrac{1}{2}(\dot{a}^* \dot{a} - k^2 a^* a)\, dt + \frac{i}{\hbar}\sqrt{4\pi} \int dt\, a \sum_j \dot{q}_j(t) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_j(t)) \right\} \tag{30-23}$$

となる．(30-23)式を計算するとき，それをGに代入すれば，最終的に，物質座標q_j上の経路積分ができる．したがって，(30-23)式で，おのおのの$\mathbf{q}_j(t)$は時間について固定された関数であり（あとでその上で積分してしまう）．したがって，(30-23)式は強制振動の調和振動子の経路積分になっている．これが，このやり方の鍵で，ポーラロンでもうまくいったのを憶えているだろうか（21章）．(30-23)式の解につ

いては，6章を参照してほしい．結果だけを述べておくと，それぞれのモード$I_{l\mathbf{k}}$は本質的に

$$I_{l\mathbf{k}}=\frac{i}{2}\int\sum_{i,j}e_ie_j\dot{q}_i(t)\dot{q}_j(s)\frac{4\pi}{2k}\exp(-ik|t-s|)\,dt\,ds \qquad (30\text{-}24)$$

である．q_j上での経路積分は，したがって，

$$G=\int\prod_i dq_i(\cdot)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S_{\mathrm{mat}}+I)\right] \qquad (30\text{-}25)$$

と表わすことができる．ここで，

$$I=\sum_{l=1,2}\sum_{\mathbf{k}}I_{l\mathbf{k}} \qquad (30\text{-}26)$$

である．笑われるのをおそれないで白状すると，(30-25)式は，何回見ても，深い意味があって，よくわかっていないものがたくさん隠されているように思える．(30-25)式は，電磁場などとは，フィクションにすぎないといっている．粒子は，$S_{\mathrm{mat}}+I$で与えられる作用積分をもって相互作用する．この，どちらの項も物質の座標にしか依存しない．電磁場など，なにももちだす必要がない．もちろん，補助的な座標を導入して，量Iを，(30-23)式のように，その座標上での汎関数積分として書き直すこともできるだろう．しかし，このときには，これらの座標に，基本的に重要な物理的意味を特定するのはむずかしい．すべての物理は，(30-25)式に見いだすことが可能であって，X線も，γ線も，真っ赤な夕陽ですら言挙げする必要はないのだ．

この変わった見方を一歩進めて，(30-25)式の古典的極限とはなにか，考えてみる．こうすると，相互作用を媒介する電磁場が必要だなどといわなくても，特別な自己相互作用をもつ物質の理論が出てくる．実際，そのような理論が，Fokker, Schwarzschild, Tetrode, Wheeler, Feynman によって展開された．それは，粒子のための作用積分

$$S=-\sum_{i=1}^{n}\int m_i\sqrt{dx_i^{\mu}\,dx_{i\mu}}-\sum_{i<j}e_ie_j\int\int\delta\left[\left(x_i(\tau_i)-x_j(\tau_j)\right)^2\right]dx_i^{\mu}\,dx_{j\mu} \qquad (30\text{-}27)$$

に基づいた変分原理が使われている．ただし，x_i^{μ}はi番目の粒子の（4次元ベクトル）座標，τ_iは粒子の軌道の適当なパラメータで，μに関する和の規約を使った．また，$c=1$，その他もすべて，相対論的な量として扱う．注意してほしいのは，相互作用が非局所的なことで，事実，時間について対称になっている．(30-27)式の作用積分から，通常の場と物質の方程式を，つぎの補助的な量

$$A^{\mu}(x)=\sum_j e_j\int\delta\left(\left(x-x_j(\tau)\right)^2\right)dx_j^{\mu} \qquad (30\text{-}28)$$

を定義することによって，回復することができる．この量は，厳密に，xにおけるベクトルポテンシャルと同じふるまいをする．

驚くほどのことではないが，(30-25)式から得られる有効作用積分は，(30-27)式の作用積分と本質的に同じものである．しかし，一点だけ違うのは，(ほんとうに誰も理解していないのではないかと思うのだが)，(30-27)式を与えるのは，$(S_{\mathrm{mat}}+I)$の実部であるということだ．虚部の役割は，ちょっと謎めいているが，量子電磁力学の計算には登場するから，ただ無視してしまうというわけにもいかない．

電磁場についてのこの風変りな見方を前進させたところで，その神秘的な意味あいから離れるために，2，3コメントをつけ加えておきたい．まず(30-25)式は，見たとおり，種々の遷移振幅について，いえることすべてを表現しつくしてはいないということだ．1つは，真空-真空遷移振幅であって，量Iは，始状態または最終状態に励起があることによって少しだけ，変化を受ける．しかし，時間間隔を長くとりよぶんの粒子を追加することによって外向き波をとりあげると，一般的な確率振幅が，原理的には真空-真空振幅に帰着させることができる．もっと的を得た批判をすることも可能である．それは，もともと，物質について先に経路積分を実行し，電磁場の配置の間の確率振幅を残しておくこともできたはずだ，というものである．そうすれば，物質がフィクションだということになる．この場合には，(30-23)式や(30-24)式のような，あらわな形の解はなく，数学も複雑になってしまうが，原理的には同じことである．

(30-25)式，それは普通の経路積分になっているが，これから出発すれば，通常の方法を使って，量子化された電磁場を通して相互作用する粒子の量子力学を実行することができる．摂動論ならば，$\exp(iI/\hbar)$を級数に展開すればよい．ダイアグラム自体は10章で扱ったが，ここでの級数のダイアグラムは，もともと提案された形のファインマンダイアグラムになっている．

ノート

本章では，(32-25)式から興味のある物理量を計算する方法には触れなかった．この詳細は，すべて

R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965

に載っている．これには，われわれが使った方程式の導出も書かれている．また，

R. P. Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interactions, *Phys. Rev.* **80**, 440 (1950)

G. C. Dente, Classical Limit of Quantum Electrodynamics, *Phys. Rev. D* **13**, 1733 (1975)

も見よ．遠く離れた点に作用する電磁力学の理論，(30-27)式は，

J. A. Wheeler and R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 159 (1945) ; **21**, 425 (1949)

に与えられている．経路積分を使った，場の理論の形式論は

G. Rosen, *Formulations of Classical and Quantum Dynamical Theory*, Academic Press, New York, 1969

に見られる．場の量子論の厳密な研究では，場のあらっぽさにもかかわらず，汎関数積分が，きわめて有効であることがわかっている．この領域における発展は，

J. Glimm and A. Jaffe, Functional Integral Methods in Quantum Field Theory ; J. Glimm and A. Jaffe, A Tutorial Course in Constructive Field Theory, in M. Levy and P.Mitter, Eds., *New Developments in Quantum Mechanics and Statisitical Mechanics* ; *Cargese 1976*, Plenum, New York, 1977

にまとめられている．

30.2 不完全平方

恒等式

$$\exp(b^2)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-x^2+2xb) \qquad (30\text{-}29)$$

を考える．この証明は，

$$x^2-2xb=(x-b)^2-b^2$$

から明らか．こんな自明なことが，補助変数を導入しなければならないという犠牲をともなうものの，指数関数の2乗の項("b^2")を線形項("$2xb$")で置きかえるための強力な手段になるのだ．この仕掛けが汎関数積分で効いてくる理由は，2乗の項からくる無限大を避けたい場合がよくあることや，補助変数についての積分が汎関数積分の形をとることがあるからである．

余談と，あとでの応用の予告を兼ねて，汎関数積分を含まない，つぎの2つの例を考えてみよう．

最初は，強磁性体のキュリー‐ワイス(Curie-Weiss)模型である．それぞれが±1の値をとるN個のスピンσ_i, $i=1, \ldots, N$の集合が，長距離力で相互作用しており，そのスピン配置のエネルギーが

$$E=E(\sigma_1,\ldots,\sigma_N)=-\frac{J}{N}\sum_{i=2}^{N}\sum_{j=1}^{i-1}\sigma_i\sigma_j-h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \qquad (30\text{-}30)$$

で与えられるとする．ここで，J は結合定数，h は外部磁場である．分配関数と自由エネルギーは

$$Z_N=\sum_{\{\sigma\}}\exp(-\beta E(\sigma_1,\ldots,\sigma_N));\qquad F_N=-\frac{1}{\beta N}\log Z_N \tag{30-31}$$

であって，和はすべての配置についてとる．また，β は温度の逆数．$\sigma_i^2=1$ を使い，$M=\sum_i\sigma_i$ を定義すると，Z_N は

$$Z_N=\sum_{\{\sigma\}}\exp\left\{-\frac{\beta J}{2}+\frac{\beta J}{2N}M^2+\beta hM\right\}$$

になる．ここで，恒等式(30-29)式を使い，和と積分の順序を交換すると，

$$Z_N=e^{-\beta J/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-x^2)\sum_{\{\sigma\}}\exp\left[M\left(2x\sqrt{\frac{\beta J}{2N}}+\beta h\right)\right] \tag{30-32}$$

のように書き直される．普通なら，スピン配置についての和がいちばんむずかしいところだが，(30-32)式では，M が1次の形だけで現れるから，σ_k, $k=1$, …, N のおのおのの和が別途にできてしまう（スピンは，集団的な外場 $h+2x\sqrt{J/(2\beta N)}$ のなかで，独立粒子のようにふるまう）．配置について和をとると，

$$Z_N=e^{-\beta J/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-x^2)\left[2\cosh\left(2x\sqrt{\frac{\beta J}{2N}}+\beta h\right)\right]^N \tag{30-33}$$

が得られる．この積分にラプラス法（変数変換 $\eta=x\sqrt{2/(\beta JN)}$ をしてから）を応用すると，$N\to\infty$ に対して，

$$F=\lim_{N\to\infty}F_N=\min_{\eta}\left[\tfrac{1}{2}J\eta^2-\frac{1}{\beta}\log\cosh(\beta J\eta+\beta h)\right] \tag{30-34}$$

となる．最小値を与えると仮定される η の値は，

$$\eta=\tanh(\beta J\eta+\beta h) \tag{30-35}$$

を満たす．これは，磁化に関する平均場理論でよく知られた式である（これは，偶然ではない．磁化は $\partial F/\partial h$ であり，$F=\min\psi(\eta,h)$ と書けば，$\partial F/\partial h=\partial\psi/\partial h$，そして，$\partial\psi/\partial h$ がまさに η だということは，簡単に分かる）．$h=0$ のときに，$\beta J>1$ で1次相転移があり，2次相転移は，$\beta J=1$ で起きる．

(30-29)式を使う2番目の例としては，解析接続がある．積分

$$F(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-x^2-\lambda x^4) \tag{30-36}$$

を考えよう．これは，Re$\lambda>0$では，解析的だが，Re$\lambda<0$になると質が悪くなるのも明らかだ．$\exp(-\lambda x^4)$の部分に対して，(30-29)式を使い，積分順序を入れかえると（Re$\lambda>0$に対してだけ）

$$F(\lambda)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(-y^2)\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left(-x^2+2i\sqrt{\lambda}\,x^2y\right) \qquad (30\text{-}37)$$

ここで，xの積分は実行できるから

$$F(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\frac{\exp(-y^2)}{\sqrt{1-2iy\sqrt{\lambda}}} \qquad (30\text{-}38)$$

となる．この積分は，λが実で負の場合を除けば，いたるところ「健康」である．このように不完全平方を使えば，解析接続も簡単にできる（この積分の解析接続を他の方法で調べようと思ったら，13章と28章を見るとよい）．

多次元では「不完全平方」（補助的な汎関数積分になる）を，より一般的な形にしておくと便利である．すなわち，

$$\exp\left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}x_iA_{ij}x_j\right]=(2\pi)^{-N/2}[\det A]^{-1/2}\int d^Nu \times\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}u_i(A^{-1})_{ij}u_j+\sum_{i=1}^{N}u_ix_i\right\} \qquad (30\text{-}39)$$

（証明は(6-24)式を見よ）もう一度，スピンモデルを考えよう．ただし，今度は前ほど簡単ではない．d次元の格子上にN個のスピンが乗っているとする．配置のエネルギーは，

$$E=-\frac{1}{2}\sum_{i,j}\sigma_iJ_{ij}\sigma_j-h\sum_i\sigma_i \qquad (30\text{-}40)$$

で与えられる．ここで，$i,j\in Z^d$である．最近接相互作用のイジングモデルは，$\|i-j\|=$［iとjのユークリッド距離が］1ならば，$J_{ij}=$（正定数），それ以外はゼロ，と置くことに対応する．しかし，ここでは，この条件には拘束されないものとする．ここでも，分配関数は，$\exp(-\beta E)$の和で，(30-39)式にしたがって，不完全平方の方針でいけば，

$$Z_N=(2\pi\beta)^{-N/2}(\det J)^{-1/2}\int d\phi_1\cdots d\phi_N\exp\left[-\frac{1}{2\beta}\sum_{i,j}\phi_i(J^{-1})_{ij}\phi_j\right] \times\sum_{\{\sigma\}}\exp\left[\sum_i\sigma_i(\phi_i+\beta h)\right] \qquad (30\text{-}41)$$

を得る．前と同じように，配置についての和は自明で

$$Z_N=\left(\frac{2}{\pi\beta}\right)^{N/2}(\det J)^{-1/2}\int d\phi_1\cdots d\phi_N$$

$$\times\exp\left\{\frac{-1}{2\beta}\sum_{i,j}\phi_i(J^{-1})_{ij}\phi_j+\sum_i \log\cosh(\phi_i+\beta h)\right\} \tag{30-42}$$

と実行できる．ある種の行列 J_{ij} をとると，(30-42) 式は見なれた汎関数積分になっている．特に，ある近似の範囲では，J^{-1} はヤコビ行列のように見えるから，$N\to\infty$ の適当な極限でのふるまいに対しては，$\Sigma\phi J^{-1}\phi$ の項は $(\mathrm{const})(\nabla\phi)^2+(\mathrm{const})\phi^2$ になる．こうして，離散スピンモデルが汎関数積分になる．

演習：　J_{ij} が並進対称性をもつ（すなわち $i-j$，つまり r_i-r_j だけの関数になっている）とする．上に述べた極限的ふるまいは，どういう環境で見られるか．J_{ij} を使って表わされる定数とはなにか．

逆行列が特に簡単になる種類の J_{ij} がある．つごう上 $d=1$ とする．また，

$$J_{ij}=g\gamma v(\gamma|i-j|) \tag{30-43}$$

とする．ここで

$$v(r)=e^{-r} \tag{30-44}$$

すると，変数変換をいろいろ行なって

$$Z_N=e^{-g\beta N\gamma/2}\sum_{\{\sigma\}}\int d\phi_1\cdots d\phi_N\exp\left[\sqrt{\beta J\gamma}\sum_{k=1}^{N}\phi_k\sigma_k+h\beta\sum_{k=1}^{N}\sigma_k\right]$$

$$\times W(\phi_1,\ldots,\phi_N) \tag{30-45}$$

を得る．ただし，

$$W(\phi_1,\ldots,\phi_N)=w(\phi_1)P_\gamma(\phi_1,\phi_2)P_\gamma(\phi_2,\phi_3)\cdots P_\gamma(\phi_{N-1},\phi_N)$$

$$w(\phi)=(2\pi)^{-1/2}\exp\left(-\frac{\phi^2}{2}\right)$$

$$P_\gamma(\phi,\phi')=\left[2\pi(1-e^{-2\gamma})\right]^{-1/2}\exp\left\{\frac{-(\phi'-\phi e^{-\gamma})^2}{2(1-e^{-2\gamma})}\right\}$$

量 $W(\phi_1,\ldots,\phi_N)$ は，“J^{-1}” を含む項である．また，(30-44) 式が特別なのは，W が因数分解されて，ϕ を 1 度に 2 個ずつ含む項の積の形になっていることである．配置についての和は，例のとおり簡単であり，また，W が因数分解されているために，

Z_Nがある種の線形演算子の$(N-1)$次のべきになる．

こうして，少し計算を続けると，

$$Z_N = e^{-\beta g N\gamma/2} 2^N \int d\phi\, d\phi'\, h(\phi) K^{N-1}(\phi,\phi') h(\phi') \tag{30-47}$$

となる．ここで，

$$h(\phi) = \left[w(\phi) \cosh\left(\sqrt{\beta g \gamma}\, \phi + \beta h \right) \right]^{1/2} \tag{30-48}$$

で，K^{N-1}はつぎの積分核

$$K(\phi,\phi') = \left[\cosh\left(\sqrt{\beta g \gamma}\, \phi + \beta h \right) \right]^{1/2} \sqrt{\frac{w(\phi)}{w(\phi')}}\; P_\gamma(\phi,\phi') \left[\cosh\left(\sqrt{\beta g \gamma}\, \phi' + \beta h \right) \right]^{1/2} \tag{30-49}$$

の$(N-1)$次のべきである．これからただちに，この積分核の最大固有値の対数として，自由エネルギーが与えられる．より詳しいことは，後の参考文献を見られたい．

上の議論でもっとおもしろいのは，1次元 $d=1$ で，$r=|i-j|\to\infty$ となるときに

$$v(r) \sim \frac{1}{r^\alpha} \qquad 1<\alpha\leqslant 2 \tag{30-50}$$

となる場合である．そのような中距離の相互作用がある場合には，たとえ1次元であっても，相転移を起こす（$\alpha=2$ については，問題が残っているが）．

ちょっと見たところでは，(30-50)式と(30-44)式は違う問題のように思われるかもしれないが，Kac と Thompson は

$$v(r) = \int_0^1 d\lambda\, \lambda^{\alpha-1} e^{-\lambda r} \tag{30-51}$$

ととった．これは，正しい漸近的挙動をもつ．vは，m個の指数関数の離散的な和

$$v(r) \cong \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{m} \left(\frac{k}{m} \right)^{\alpha-1} e^{-kr/m} \tag{30-52}$$

で近似される．どの有限のmに対しても，Jの逆が存在し，Zは，$L^2(\mathrm{R}^m)$上[(30-49)式の場合のR^1のかわりに]の演算子の核の最大固有値から得られる．

Kの固有値は，m次元のある種のシュレーディンガー方程式を解くことで近似できることがわかっている．また，固有値を見つけるうまい方法は，ファインマン-カッツ公式が使えるように，別の汎関数積分を導入することである．そして，この固有値を，汎関数積分に関して行なったインスタントンの技術を応用して，解析接続することができる．詳細は，28章と本章の引用文献を見ていただきたい．

「不完全平方」のやり方と，ラプラス法を組みあわせて，いろいろな平均場理論をつくることができる．ラグランジアン

$$\mathfrak{L}(\phi)=\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2-\frac{1}{2}m_0\phi^2-\frac{1}{4}\lambda_0\phi^4 \tag{30-53}$$

を考えよう．ここで，ϕは，自己相互作用ϕ^4をもつ相対論的な場である．場の量子論におけるあらゆる種類の振幅は，汎関数積分

$$G=\int d\phi(\cdot)\exp\left(-\int d^dx\mathfrak{L}(\phi)\right) \tag{30-54}$$

から得られる．ここで，ϕ^4に対して不完全平方を応用することにし，そのための補助変数ψを入れる．つまり，

$$G=\int d\psi(\cdot)\,d\phi(\cdot)\exp\left(-\int d^dx\mathfrak{L}(\phi,\psi)\right) \tag{30-55}$$

となり，ここで

$$\mathfrak{L}(\phi,\psi)=\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2-\frac{1}{2}m_0\phi^2-\frac{1}{2}\lambda_0\psi\phi^2+\frac{1}{4}\lambda_0\psi^2 \tag{30-56}$$

と与えられる．ここで，ϕについては積分できて[(30-37)式の1次元積分のように]，扱いにくいψの積分が残る．そこで，ラプラス法をψの積分に応用すると，平均場の理論と，そのまわりでの摂動論が出てくる．

ハミルトニアンに，互いに交換しない演算子が含まれている場合にも，「不完全平方」が役に立つことがある．ハミルトニアン

$$H=H_0+AB \tag{30-57}$$

を考える．ここで，

$$[A,B]=0 \quad \text{しかし} \quad [H_0,A]\neq 0, \quad [H_0,B]\neq 0$$

この積ABを「線形化」したい．そのために，

$$AB=\frac{1}{4}(A+B)^2-\frac{1}{4}(A-B)^2$$

を使い，2つの実（または1つの複素）の補助的な積分を導入する．この際，AとBがH_0とは交換しないということから，2つの補助変数だけでは不十分で，実際，時間順序積を使わなければならない．最終結果は，

$$\exp(-H)=T\int dz(\cdot)\exp\left[\pi\int_0^1 d\tau|z(\tau)|^2\right]\times\exp\left\{-\int_0^1 d\tau\left[H_0+\sqrt{\pi}\,Az(\tau)-\sqrt{\pi}\,Bz^*(\tau)\right]\right\} \tag{30-58}$$

となる．ここで，$z(\tau)$は，$0\leqslant\tau\leqslant 1$での複素関数である．記号からわかるように“$T$”は，時間（つまり$\tau$）の順序積，22.1節の積分と同じように考えればよい．(30-58)

式を考えるなかで，Andersonは多くの近似法を編みだした．その1つが，いわゆるアンダーソンモデルである（引用文献参照）．ただし，時間順序積に適用した最急降下法のあるものについては，数学的に少し微妙な問題があると思う．

ノート

「不完全平方」に関する題材は，

M. Kac, Mathematical Mechanisms of Phase Transitions, in M. Chretien, E. P. Gross, and S.Deser, Eds., *Statisitical Physics : Phase Transitions and Superfluidity*, Vol.1, Proc. Brandeis Univ.Summer Institute, Gordon and Breach, New York, 1968

にある．$r^{-\alpha}$のポテンシャルの場合の自由エネルギーを，インスタントンの技法を使って解析接続したのは，

R. J. McCraw, Metastability in a Long Range One-Dimensional Ising Model, *Phys. Lett.* **75A**, 379 (1980)

である．より詳しくは，インディアナ大学へ提出した彼の学位論文を見られたい．補助変数を使って，平均場理論を研究したのは

C. M. Bender, F. Cooper, and G. S. Guralnik, *Ann. Phys.* **109**, 165 (1977)

である．不完全平方を，非可換演算子に応用することについては，

B. Mühlschlegel, Functional Integrals and Local Many-Body Problems : Localized Moments and Small Particles, in *Functional Integration and its Applications*, A. M. Arthurs, Ed. (1974 Conference), Clarendon Press, Oxford, 1975

に簡単な報告がある．

30.3　ゴム：ランダムウォークとしての高分子の汎関数積分

ある種の目的においては，高分子を，1歩の長さがlのランダムウォーク（酔歩）と考えても構わないことがある．ここで，lは，個々のモノマーの長さである．もう少し精密化したければ，1度通った点を2度と通らない自己回避型のランダムウォークを要請すればよい．しかし，この非マルコフ的な性質はかなり複雑で，ここでは無視することにする．酔歩の高分子模型からは，エントロピー効果のみによる弾性力が出てくる．これを見るために，平面上に置かれ，両端が固定されている高分子を考えよう．いま，指を，その平面の1点Rに置いたと考えよう．こうすると，Rのまわりの回転数（23章）を使って，経路（高分子）を分類できる．経路が回転数nをもつ確率$p_n(R)$は，Rの関数であり，そのような分子の集合のエントロピー

が，回転数の確率分布に関して最大になるように選ばれる．そこで，指を動かしてみよう．ゴムバンドは，指の下をすべらないから，p_nの値は変わらない．しかし，指のほうは，別の点R'に移っており，その点では，別の回転数分布$p_n(R')$によって，最大エントロピーが得られている．こうして，指を移動させることで，エントロピーを下げることになる．エントロピーが下がれば，自由エネルギーのほうは上がる．したがって，$p_n(R)$の変化によって，回復力が与えられる．こうして，弾性力は$p_n(R)$と$\partial p_n(R)/\partial R$を使って表わすことができる．このエントロピー減少は，トポロジカルな制限条件から生みだされる，と特徴づけることができる．

$p_n(R)$の計算が残っている．これは，基本的にはウイーナー積分である．ただし，その測度は，経路空間のある部分集合をとる．$p_\theta(R)$を計算するのが便利である．これは，点Rのまわりで角度θ（θは2πを法として計算しないで，全回転数間まで含めるものとする）だけ進む経路の集合の測度である．それは，

$$p_\theta(R)=(\text{const.})\int dr(\cdot)\,\delta\left[\theta-\int_0^L\left(\frac{x\dot{y}-y\dot{x}}{x^2+y^2}\right)d\tau\right]\exp\left[-\frac{1}{l}\int_0^L\dot{r}^2\,d\tau\right] \tag{30-59}$$

と書くことができる．ここで，xとyは平面上の座標で，$(x\dot{y}-y\dot{x})/(x^2+y^2)$の積分は，進んだ全角度である．デルタ関数は，$\delta(\theta-K)=(2\pi)^{-1}\int\exp[i\lambda(\theta-K)]\,d\lambda$であるから，かんじんな部分は，

$$(\text{const.})\int dr(\cdot)\exp\left\{-\frac{1}{l}\int_0^L(\dot{r}^2+i\mathbf{A}\cdot\mathbf{r})\,d\tau\right\} \tag{30-60}$$

のフーリエ変換になる．ただし，

$$\mathbf{A}=\frac{\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{z}}}{r^2} \tag{30-61}$$

である．

こうやって，ゴムの弾性係数は，ある磁場のなかに置かれた粒子の経路積分（あるいは，その解析接続）を使って計算することができる．その経路積分は実行可能だから，弾性係数の表式が得られる．

ノート

この研究とその発展は，

S. F. Edwards, Statistical Mechanics with Topological Constraints, I, *Proc. Phys. Soc.* **91**, 513 (1967); II, *J. Phys. A* (*Proc. Phys. Soc.*) *Ser.* 2, **1**, 15 (196

S. F. Edwards, Functional Problems in the Theory of Polymers, in *Functional Integration and its Applications*, A. M. Arthurs, Ed. (1974 Conference), Clarendon Press, Oxford,1975

を見られたい．

30.4　剛体球気体と第二ビリアル係数

いまから出てくる計算は，Liebによるものであるが，これは技術的な点で価値が高い．それは，他の大部分の方法にくらべて（調和振動子に帰着できるものは別として），多次元の離散化された経路和の積分（つまりトロッター公式）をもっとも忠実に実行するものであり，私が知るかぎり前にも後にもこれに類似する方法はない．

扱う物理の問題としては，剛体球気体に関するものである．標準的な統計力学によって，量子力学的な第二ビリアル係数の計算は，通常の量子力学の1次元問題に帰着する．具体的には，粒子-粒子間相互作用が，$v(r)$（半径$a/2$の原子からなる剛体球気体では，$r>a$では$v(r)=0$，$r<a$では$v(r)=\infty$）で，1個の原子の質量がmだとすると，第二ビリアル係数は，グリーン関数

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2+v(r)+\frac{\partial}{\partial t}\right]G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}')=0 \qquad t>0$$

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}')\to\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad \text{for } t\downarrow 0 \qquad (30\text{-}62)$$

から得られる．第二ビリアル係数は，2つの項からなる．つまり，直接項と交換項で，それぞれ

$$B_d=\tfrac{1}{2}N\int d^3r\left[1-2\sqrt{2}\,\Lambda^3G(\mathbf{r},\beta;\mathbf{r})\right] \qquad (30\text{-}63\text{a})$$

$$B_e=\mp\sqrt{2}\,\Lambda^3N(2s+1)^{-1}\int d^3rG(\mathbf{r},\beta;-\mathbf{r}) \qquad (30\text{-}63\text{b})$$

で，

$$B=B_d+B_e$$

である．(30-63)式でNはアボガドロ数，βは温度の逆数，sは原子のスピン，そして

$$\Lambda^2=\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}$$

である．(30-63b)式の記号の上側と下側は，それぞれ，ボソンとフェルミオンに対応している．

剛体球の場合には，半径aの球のなかには入れないということを除けば，自由粒子の問題と基本的に同じである．ここでは，特にB_eの，高温側でのふるまいを調べる．これが物理的に興味をもたれる理由は，Liebが議論している．高温では，βは

小さく，B_e は β^{-1} に対して指数関数的な依存性をもつ．具体的に，Lieb は

$$\log\left[\frac{B_e}{B_e^{(0)}}\right]=-\frac{\pi}{4}\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right)^2+\mathrm{O}\left[\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right)^{3/2}\right] \tag{30-64}$$

であることを示した．ここで，$B_e^{(0)}$ は，剛体球の芯が存在しないときの自由粒子の交換係数．$B_e^{(0)}$ は，簡単に計算できる．自由粒子のグリーン関数だけを使って，

$$B_e^{(0)}=\mp\frac{N\Lambda^3}{4\sqrt{2}}(2s+1)^{-1} \tag{30-65}$$

となるからである．

(30-64)式は，グリーン関数の上限と下限から導かれる．これらの上下限は，それらの主要項[(30-64)式の右辺第1項]が一致しているという，利点をもっている．いまわれわれは，ウイーナー積分 [(30-62)式参照]を扱っているから，限界値は，なんらかの経路からの寄与を捨て去れば得られる．しかし実際には，いうほど簡単ではない．実際問題として行なうことは，あるチューブの外側の経路を全部捨ててしまい，このチューブのなかの経路和の下限を計算することである．その後，チューブの位置を動かして最良の下限値を求める．上限値のほうでは，剛体球の入りこめる経路を追加する．しかし，このときには，これらの経路にはいくらか小さい重みをつけて和をとり，上限に歯止めをかけておく．ここでは下限だけを詳しく述べる．

例によって，グリーン関数は

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}')=\lim_{n\to\infty}G_n(\mathbf{r},t;\mathbf{r}')$$

$$G_n(\mathbf{r},t:\mathbf{r}')=\int_{|\mathbf{r}_j|>a}d^3r_1d^3r_2\cdots d^3r_n\left(\frac{m}{4\pi\hbar^2\varepsilon}\right)^{3(n+1)/2}$$
$$\times\exp\left[\frac{-m}{4\hbar^2\varepsilon}\sum_{j=0}^{n}(\mathbf{r}_{j+1}-\mathbf{r}_j)^2\right] \tag{30-66}$$

で与えられる．ただし，$\varepsilon=t/(n+1)$, $\mathbf{r}_0=\mathbf{r}'$, $\mathbf{r}_{n+1}=\mathbf{r}$ [(30-62)式では t が通常とは異なる次元で定義されているので，$\hbar$ は2乗されている]．それぞれの $\mathbf{r}_j$ の積分限界，つまり $|\mathbf{r}_j|>a$ は，剛体球の条件を考慮に入れたものになっている．この積分限界に関する制限条件は，指数関数型

$$\exp\left(-\varepsilon\sum_j v(\mathbf{r}_j)\right) \tag{30-67}$$

の無限ポテンシャルを使って置き直すこともできる．これは，9章と28章での，「最初の通過（到達）時間」の議論のところでも行なったことである．(30-66)式型

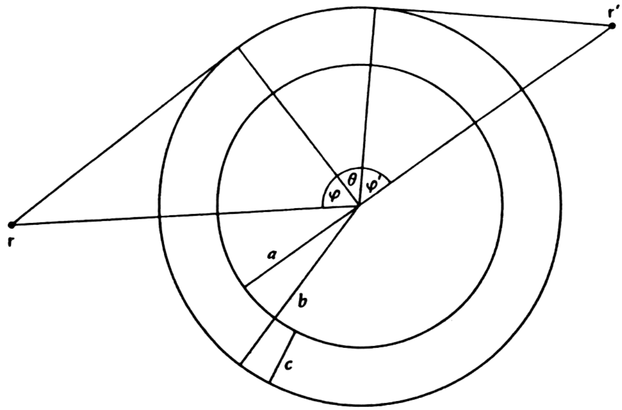


図30.1　剛体球の汎関数積分に含まれる量

の表現があるときにいままでよく使った手は，両端をつなぐ古典経路のまわりで展開することである．しかし，球が，$\mathbf{r}$と$\mathbf{r}'$を結ぶ直線上にあるときには（$\mathbf{r}'=-\mathbf{r}$となるから，われわれのケースではこれが起きる），そのような古典経路は存在しない．このときには，球面に沿った波を考えることができるが，これについては，ノートで述べることにする．しかし，ここでの下限の計算において，そのまわりで展開したい経路は，つぎのようなものである．

bを$a<b<\min(r, r')$を満たす数とする．W_bを，原点に中心をもつ半径bの球とする．$\mathbf{x}(\tau)$を，$\mathbf{r}'$から出発して，W_bに接するように出会うまでまっすぐ進み，接してからは大きな円W_bに沿って走り，さらにW_bから接するように離れていき，以後は一直線で$\mathbf{r}$に到達する経路とする（図30-1）．経路$\mathbf{x}(\tau)$は，全部$\mathbf{r}$と$\mathbf{r}'$および原点を含む面上にとる．（$\mathbf{r}'=-\mathbf{r}$に対しては，この面は一意的に決められない．このことで，上限の計算に，コースティクスに関連した困難が出てくるが，ここでは無視する）．図30-1を見よ．経路の長さは，$L_b=r\sin\varphi+r'\sin\varphi'+b\theta$で，図の角度を使って表わされている．経路を全面的に特定するには，時間が与えられたときの位置がわらなければならない．W_bの面上を含めて，同じ時間に同じ距離だけ進むようにしておく．

経路積分は$\mathbf{x}(\tau)$のまわりで展開する．しかし，古典経路の場合と違って，ずれに関する1次の項が消えないで残る．$\mathbf{y}(\tau)=\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{x}(\tau)$とする．ただし，$\mathbf{r}(\tau)$は，(30-66)式の中のダミー変数にともなう折れ線経路である．古典作用積分をSとする．

すると，

$$S[\mathbf{r}(\tau)]=S[\mathbf{x}(\tau)]+\delta S+\delta^2 S$$

と展開される．ここで，$\delta^2 S$ は通常の形，つまり，$\mathrm{const.}\cdot\Sigma(\mathbf{y}_{j+1}-\mathbf{y}_j)^2$ である．1 次の項は，

$$\frac{\mathrm{const.}}{\varepsilon}\sum \mathbf{y}_j\cdot(\mathbf{x}_{j+1}-2\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1}) \tag{30-68}$$

で，明らかに，W_b 上での $\mathbf{x}(\tau)$ の曲率からきており，$\mathbf{x}(\tau)$ が W_b に乗っかっている j に対してだけ寄与がある．

(30-68) 式を解析する前に，$\mathbf{y}$ の積分のなかに，$\mathbf{r}$ の積分にかかっていた制限が複雑な形で受け継がれていることに注意しておく．しかし，$\mathbf{y}$ を

$$|\mathbf{y}_j|<b-a\equiv c \quad すべての\ j \tag{30-69}$$

に限定しておくと，$\mathbf{r}$ に対する制限も満たされる．このように簡単化することの代償として，$\mathbf{x}(\tau)$ の直線上の経路は，遠くへさまよい歩くことはできないし，W_b から遠く離れることもできない．しかし，われわれが求めている $1/\beta$ についての漸近的な次数関係に対しては，これらからの寄与は消えてしまい，したがって，この目的に関するかぎり，なにも失うものはない．この段階で，下限を得るために，経路を捨てることを行なう．(30-69) 式の条件を使って，$\delta^2 S$ を含む残りの汎関数積分の計算が簡単になるように(30-68) 式の限界値をも求めることができる．差 $\mathbf{x}_{j+1}-2\mathbf{x}_{j+1}+\mathbf{x}_{j-1}$ は，本質的に $\varepsilon^2 d^2\mathbf{x}/d\tau^2$ であり，円周に沿っては定数である．したがって，$|\mathbf{y}\cdot\ddot{\mathbf{x}}|\leqslant|\mathbf{y}||\ddot{\mathbf{x}}|$ を使って

$$\exp\left[-\frac{(\text{正定数})}{\varepsilon}\sum \mathbf{y}_j\cdot(\mathbf{x}_{j+1}-2\mathbf{x}_j+\mathbf{x}_{j-1})\right]\geqslant\exp(-kc)$$

が得られる．ただし，k は，1 のオーダーの（ε のオーダーではなく）正定数である．Lieb は，この定数を評価し，$\exp(\mathrm{const.}\cdot\delta S)$ の形の汎関数積分が

$$\exp\left(-\frac{mL_b c\theta}{2\hbar^2 t}\right) \tag{30-70}$$

によって，下から抑えられていることを示した．

$S(\mathbf{x}(\tau))$ を含む項は，簡単に計算できて，経路積分に

$$\exp\left(-\frac{mL_b^2}{4\hbar^2 t}\right) \tag{30-71}$$

の因子をつくりだすことがわかる．

最後に，$\delta^2 S$の作用積分をもつ経路積分を処理しなければならない．作用積分の形は，ただの自由粒子のそれだが，積分変数は，$|y_j| \leqslant c$の制限条件を受けている．ただ，この条件は非常に扱いやすく，われわれの汎関数積分は，半径cの球のなかに留まるように制限された粒子のグリーン関数と同じものであることがわかる．これを$G_c(\mathbf{r}, t\,;\,\mathbf{r}')$と書こう．さらに，定義によって$\mathbf{y}(\tau)$は，ゼロから始まってゼロで終わるから，2つの空間変数がともに原点にある状態でグリーン関数を評価したい．G_cの汎関数積分を計算するかわりに，その固有関数展開を見る．$G_c(0, t\,;\,0)$だけが必要なので，s-波成分だけが寄与することに注意する．こうして，

$$G_c(0, t; 0) = \sum_{s\text{-波だけの}\,\alpha} |\psi_\alpha(0)|^2 \exp(-tE_\alpha)$$

と展開される．ただし，E_αとψ_αは，それぞれ，固有値と固有関数である．これらの値は，よくわかっていて，下限値を得るためには，最低固有値を除いて捨ててしまうと，

$$G_c(0, t; 0) > \frac{\pi}{2c^3} \exp\left(-\frac{\hbar^2 \pi^2}{mc^2} t\right) \tag{30-72}$$

が得られる．

以上のすべての下限値を組みあわせると，

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}') > \frac{\pi}{2c^3} \exp\left\{-\frac{L_b^2 + 2L_b c\theta}{\alpha t} - \left(\frac{\pi\sqrt{\alpha}}{2c}\right) t\right\} \tag{30-73}$$

となる．ただし，$\alpha = 4\hbar^2/m$, $c = b - a$である．ここで，$\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$と置き，もっともよい下限を求めるために，(30-73)式の右辺をcに関して最大にする．L_bは，(φ, φ', θを固定することによって）複雑な形でcに依存しているので，この手続きはむずかしい．しかし，粒子が最接近した場合には，交換項がいちばん重要になる，つまり，積分(30-63b)式で，$r \gtrsim a$の場合である．このrに対しては，cはゼロに近いはずである，つまり，$c \sim r - a$．単純化してものを考えるために，すべてのrに対して$c = r - a$ととってしまおう．このように選ぶと，上限と下限が一致するので，漸近展開の最初のオーダーで，これよりよい選択はないはずである．

残りの作業としては，$c = r - a$で評価された(30-73)式の表現をつくることと，[(30-63b)式のように]rで積分して，次数関係式(30-64)式に必要な不等式を得ることである．ここでは，この積分は調べない．詳細は，Liebの論文を参照していただきたい．

経路積分の上限は，同じ経路$\mathbf{x}(\tau)$で，今度は$b = a$とし，そのまわりで展開する

ことによって得られる．$\mathbf{x}(\tau)$の直線部分では，制限条件はすべてつけない．一方，球上では，球のなかの経路を許す．ただし，その寄与は小さくなるようにしておく．最終結果は，(30-64)式に必要な別の不等式を与える上限値となる．

ノート

ここで紹介した研究は，

E. H. Lieb, Calculations of Exchange Second Virial Coefficient of a Hard-Sphere Gas by Path Integrals, *J. Math. Phys.* **8**, 43 (1967)

から採った．この論文には，交換係数の物理的重要性が議論されている．また，下限と上限の計算が詳しく載っている．ビリアル展開の背景については，どんな統計力学の教科書にも載っている．

交換係数の計算は本質的に回折現象と同じ問題である．上のLiebの論文に加えて，

V. S. Buslaev, Continuum Integrals and the Asymptotic Behavior of the Solutions of Parabolic Equations as $t \to 0$ Applications to Diffraction, *in Topics in Math. Phys.*, Sh. Birman, Ed., English translation by Consultants Bureau, New York, 1967

を参照されたい．この論文では，$t \to 0$に対する$G(\mathbf{r}, t\,;\mathbf{r}')$のグリーン関数の漸近公式を得るために，汎関数積分の手法が使われている．Buslaevは，多次元の凸型の物体を扱った．特に，物体に沿って這う波（凸型物体の表面の古典経路にともなう「包絡線」）が経路積分に寄与することを見いだした．

30.5 コンピュータによる経路和

経路積分に初めて出くわしたとき，無限個の経路を足しあわす，その膨大な作業に嫌になった人もいるかもしれない．その後，トロッター公式に暗に含意されている和の実行方法や，たくさんの解析的なトリックを使って，経路の全面的な和を避ける方法などを知るにつれて，経路積分は前ほどおそろしい代物ではなくなったはずだ．最近，（自転車についで軽量の）現代技術の最高の成果に武装した勇気ある人々が，計算機上で経路和を直接実行した．もちろん，空間と時間は，離散化する必要がある．無限次元積分には，手が届かないにしても，非常に高い次元まで試みることができる．さて，高次元の積分を実行する方法は，モンテカルロ法と重みつきサンプリング法である．つまり，多次元空間のなかで行なわれるある確率過程を使って，積分にいちばん寄与する空間の領域を見つけるというものである．モンテカルロ法を汎関数積分に応用するには，虚数時間がいちばん簡単で，したがって，

積分への寄与も実数で，いちばん重要な領域は，被積分関数の停留値ではなく最大値を与える．

ファインマン - カッツ公式から，虚数時間のグリーン関数は，いずれは基底状態のエネルギーと波動関数が支配的になってしまうことがわかっている．これから説明しようと思う経路和の方法は，こういう量の数値計算の方法として提案されたものである．

1次元で，スピンのない粒子が$H=(1/2)p^2+V$にしたがうとする．ただし，便宜上$\hbar=1$とする．xから出発して，時間Tの後に同じ点に戻る経路を足しあわせると，

$$\int_{(x,0)}^{(x,T)} dx(\cdot)\exp(-S)=G(x,-iT;x)=\sum_{\alpha}|\psi_\alpha(x)|^2\exp(-E_\alpha T)$$
$$\sim|\psi_0(x)|^2\exp(-E_0T)\qquad \text{for } T\to\infty \qquad (30\text{-}74)$$

となる．ただし，αは，Hの固有関数をラベルし，0は基底状態を表わす．(30-74)式の左辺の汎関数積分を長時間にわたって実行すると，こうして，E_0と$\psi_0(x)$を与える．（モンテカルロ法自体は，何次元の量子系でも使えるが，1次元ではψ_0は常に実かつ正にとれるから，ψ_0^2の平方根がとれる）．これらの量は，いろいろな方法でとりだすことができる．系を時間Tにわたって時間発展させると，Gの積分全体が小さくなる．どの程度の速さで小さくなるかは実際に測定でき，E_0によって決まってくる．そこで，$\exp(+TE_0)$を掛けて，再規格化することによって，波動関数をとりだすことができる．ここで使った方法は，$\psi_0(x)$を求め，つぎにこの状態のHの期待値としてエネルギーを計算するものである．問題は，したがって(30-74)式の左辺を計算することである．つまり，無限のnの極限での

$$G_n(x,-iT;x)=\int dx_1\cdots dx_n\left(\frac{1}{2\pi\varepsilon}\right)^{(n+1)/2}$$
$$\times\exp\left\{-\varepsilon\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2+V(x_j)\right]\right\} \qquad (30\text{-}75)$$

を計算すること．ただし，$x_0=x_{n+1}=x$，また，$\varepsilon=T/(n+1)$である．ここで，(30-75)式の和のなかで，いちばん重要な寄与をする一連の数列$\xi\equiv(x_0, x_1, \dots, x_n)$（ここでは経路と解釈する）を見つけたい．そのために，任意の数列から出発して，でたらめな方向に動かし，より大きな寄与をなす数列に移っていくという方法をとる．いま，

$$E(\xi;\varepsilon)=E(x_0,x_1,\dots x_n;\varepsilon)$$
$$=\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2+V(x_j)\right] \qquad (30\text{-}76)$$

とする（いつものように，$x_{n+1}=x_0$）．ある数列，$\xi^{(0)}$，から出発しよう．1からnの間の任意の整数jと，0と1の間の実数ηを，でたらめに選び，j番目の成分を除いて$\xi^{(0)}$と同じになるように，ξ'を定義する．そのξ'のj番目の成分を

$$x_j' = x_j + \alpha(2\eta - 1) \tag{30-77}$$

ととろう．ここで，数αは，εやnと同じように，パラメータで，数値積分とその離散化を特徴づける．さて，$\Delta E = E(\xi';\varepsilon) - E(\xi^{(0)};\varepsilon)$とする．もし，$\Delta E<0$ならば，「エネルギー」($E$)は，低下しているので，$\xi^{(1)}=\xi'$ととる．もし，$\Delta E>0$ならば，確率$\exp(-\varepsilon\Delta E)$で$\xi^{(1)}=\xi'$とするか，確率$1-\exp(-\varepsilon\Delta E)$で$\xi^{(1)}=\xi^{(0)}$とする．この後のほうの選択は，0から1の間の別の乱数η'を計算機のなかで発生させて，つくりだすことができる．つまり，$\eta'<\exp(-\varepsilon\Delta E)$なら，$\xi^{(1)}=\xi'$，それ以外は$\xi^{(1)}=\xi^{(0)}$とする．つぎに，同様の手続きで，$\xi^{(1)}$から$\xi^{(2)}$をつくりだす．$\xi^{(k)}$の列は，和にいちばん大きな寄与をするクラスに緩和されていくはずである．しかし，規則として$\Delta E>0$をも許しているから，Eの局所安定点（ローカルミニマム）にとらわれてしまうことはない．

原理的には，つぎに，それぞれの数列$\xi^{(k)}$に対して$\exp(-S)$を計算し，足しあわせればよい．ただし，この計算は，Gに現われるすべての変数$x(=x_0)$にわたって実行する必要がある．しかし，この方法だと，数列を生みだす過程のなかでつくりだされる，$\exp(-S)$に関する情報をむだづかいしてしまうことになってしまう．つまり，両端点だけでの値だけ注目するあまり，数列をつくるために発生したすべての点でのデータを無視することになってしまう．

実際に$\{\xi^{(l)}\}$から$\psi_0(x)$を効果的に計算するには，つぎのようにする．実数の直線を多数のビン（区間）に$[m\Delta, (m+1)\Delta)\ m=0, \pm1, \ldots$のように分ける．いま，$\{\xi^{(l)}\}$を生みだしている確率過程の特定のステップを考えよう．この段階をk番目のステップとすると，x_jには，新しい値$x_j+\alpha(2\eta-1)$をとりうる可能性がある．したがって，$\xi^{(k+1)}$のj番目の成分は，x_jか$x_j+\alpha(2\eta-1)$のどちらかの値をとる．どちらにしても，$\xi^{(k+1)}$のj番目の成分の値は，その値に対応したビン$[m\Delta, (m+1)\Delta)$にふり分けることができる．そこで，これに該当したビンに，1点を与える．この確率過程が進んでいくにつれて，それぞれのビンは，新たに点数が入るか，同じ値で残るかで，得点が変わっていく．最終的に，$\psi_0(x)^2$はxに対応するビンが獲得した総得点に比例するはずである．点数を規格化してやれば，波動関数の2乗が得られる．

なぜこの方法でうまくいくのだろう．基本的には，$\xi^{(k)}$を選ぶ際の重みが，まさにわれわれが計算したい指数関数であるからだ．後の参考文献に挙げてある説明では，そうなっている．しかし，ほかの考え方も可能である．たとえば，統計力学や

確率論がそうだが，特に，後者については，9章の主題の1つだったように，ここでもポテンシャル論との関係が出てくる．

最初に統計力学アプローチをとりあげる．固定されたnによるGの近似[(30-75)式]に対して，$E(\xi; \varepsilon)=E(x_0, x_1, \dots, x_n; \varepsilon)$を，最近接間だけに働く調和力（つまり$(x_{j+1}-x_j)^2$）と，周期境界条件をもつ1体力（つまり，$V(x_j)$）によって相互作用している，$n+1$個の粒子のエネルギーだとみなす．上で説明した確率過程$\xi^{(k)} \to \xi^{(k+1)}$を行なっている系に対して，ある状態$\xi$を見いだす確率は，$\exp(-\varepsilon E(\xi, \varepsilon))$に比例する．つまり，温度の逆数$\varepsilon$が与えられたギブス分布である（この考え方は，イジング模型の確率過程を考えるときに，広く使われる．この証明は，あとに掲げるLandauとAlbenからの引用文献に載っている）．

$n+1$個の“粒子”の1つ1つは，変化するxの値をとる．そこで，$x=a$での粒子密度，$\rho(a)$，を考えてみよう．ギブス分布からρは，

$$\rho(a)=\frac{\sum_{\xi} \exp(-\varepsilon E(\xi; \varepsilon))\,\delta(x_j-1)}{\sum_{\xi} \exp(-\varepsilon E(\xi; \varepsilon))} \tag{30-78}$$

と与えられる．ここで，系の並進対称性（粒子の気体は，周期境界条件にしたがっている）があることから，jは任意に選んで，デルタ関数の変数に使った．$j=0$ととると，(30-78)式の分子は，(30-75)式のG_nで$x=a$としたものに一致する．規格化定数は，この際重要ではなく，キャンセルしてしまう．(30-78)式の分母は，a上の積分だから，Gのトレースである．G_nのなかで使うべきTの値は，(30-75)式の後の定義にしたがって，$T=(n+1)\varepsilon$．これから，

$$\rho(a)=\frac{G_n(a, -i(n+1)\varepsilon; a)}{\int dx\, G_n(x, -i(n+1)\varepsilon; x)} \tag{30-79}$$

となる．これは，十分大きい$n\varepsilon$に対しては，(30-74)式によって，$\psi_0(a)^2$である．これから，上の得点方式による波動関数の2乗の評価法が正しいのは明らかである．つまり，それは，単にx空間における粒子の密度を測ることに対応していたのだ．

一度ψ_0がわかってしまえば基底状態のエネルギーは$E_0=(\psi_0, H\psi_0)$から得られる．

ほかにも，上の確率過程の別の見方がある．それは，オルンシュタイン‐ウーレンベック(Ornstein-Uhlenbeck)過程にしたがう1個の粒子と見ることである．これは，「ポテンシャル」$U(x) \sim -\log\psi_0(x)$の上で，フォッカー‐プランク方程式にしたがう粒子密度を考えることと同じである．これは，ブラウン粒子の経路の上でとった$\exp(-\int_0^T V(x(\tau))d\tau)$の期待値に関連して，以前（9章）で議論した確率過程と

やや異なっている．前は，ポテンシャルVは，吸収確率に関連した量であった．ポテンシャルUはそれとは異なって，離散過程での左右へのステップ，または頻度の，非対称性を表わしている．しかし，両者の確率過程を関係づけることはできる．この問題には，立ちいらないでおこう．

経路和の数値計算はいろいろな1次元系に試されたが，かなり精度がよい．また，解があらかじめわかっているものとの比較も可能である．ただ「準安定性」が現われるところや，基底状態と第一励起状態のエネルギーが非常に近いところでは，むずかしい問題が出てくる．詳細は，以下の論文を参照していただきたい．

ノート

ここで扱った経路和の計算機によるとり扱いは，

S. V. Lawande, C. A. Jensen, and H. L. Sahlin, Monte Carlo Integration of the Feynman Propagator in Imaginary Time, *J. Comp. Phys*. **3**, 416 (1969)

にある．上で述べた確率過程は，系をギブス分布にもっていくときに，熱浴のように働く．この証明は，

D. P. Landau and R. Alben, Monte Cario Calculations as an Aid in Teaching Statisitical Mechanics, *Am. J. Phys*. **41**, 394 (1973)

の付録にある．初めてモンテカルロ法を使った論文は

N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys*. **21**, 1087 (1953)

である．ウイーナー積分を，コンピュータで評価し，かつモンテカルロ法を使い，実際には，上に紹介したLawandeらの研究に先駆けていた研究が

L. D. Fosdick and H. F. Jordan, Path Integral Calculation of the Two Particle Slater Sum for He^4, *Phys. Rev*. **143**, 58 (1966)

にある．汎関数積分とフォッカー - プランク方程式の関係を調べた論文はたくさんある．2，3紹介すると，

R. Graham, Lagrangian for Diffusion in Curved Phase Space, *Phys. Rev. Lett*. **38**, 51 (1977)

L. Garrido, D. Lurie, and M. San Miguel, Stochastic Quantization and Path Integral Formulation of Fokker-Planck Equation, *Phys. Lett*. **67A**, 243 (1978)

F. Langouche, D. Roekaerts and E.Tirapegui, On the Path Integral Solution of the Master Equation, *Phys. Lett*. **68A**, 418 (1978)

H. Dekker, Path Integrals for Diffusion Processes in Riemannian Spaces, *Phys. Lett*. **69A**, 241 (1978)

オルンシュタイン - ウーレンベック過程，それにともなうフォッカー - プランク方程式，そして汎関数積分は，ある場合には，吸収をともなうブラウン運動と，簡単な変換（ゲージ変換に関係した変換）によって，関係づけることができる．

N. G. van Kampen, A Soluble Model for Diffusion in a Bistable Potential, *J. Stat. Phys*. **17**, 71 (1977)

を見よ．

30.6　経路積分による摂動展開

10章で，経路積分の摂動展開は，

$$G(x,t;x')=\int dx(\cdot)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2-\lambda V(x)\right]d\tau\right\}$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\lambda}{\hbar}\right)^n\int dx(\cdot)\left[\int_0^t V(x(\tau))\,d\tau\right]^n\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 d\tau\right] \tag{30-80}$$

の指数関数を展開すれば得られることを知った．下に掲げた論文の著者たちは，もしVがそのフーリエ変換に置きかえられていると，いちじるしい簡単化が起きることを利用している．具体的に

$$V(x)=\int e^{ikx}f(k)\,dk$$

と書くと，xに依存した部分は，指数関数のなかでは線形項になり，(30-80)式の経路積分は皆，ガウス型になり，閉じた表式を与える．この代償として，もちろん，kの積分が，それぞれの摂動の次数のなかで入ってくる．これらの積分が実際できて，摂動級数を足しあわすことができる場合もある（これをやり遂げるには，Gの位置変数の1つについて積分するとつごうがよいことがわかっている．）

ノート

この研究については，

M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, Analytic Treatment of the Coulomb Potential in the Path Integral Formalism by Exact Summation of a Pertubation Expansion, *J. Math. Phys*. **13**, 1070 (1972)

M. J. Goovaerts, A. Babcenco, and J. T. Devreese, A New Expansion Method in the Feynman Path Integral Formalism : Application to a One-Dimensional Delta-Function Potential, *J. Math. Phys*. **14**, 554 (1973)

に述べられている．

30.7 ポテンシャル ax^2+b/x^2 に対する経路積分の厳密解

ラグランジアン

$$L=\tfrac{1}{2}m\dot{x}^2-\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2-\frac{g}{x^2} \tag{30-81}$$

と，半直線 $x>0$ にある粒子を考えよう．このラグランジアンについては，ω が直接時間に依存していても，経路積分を実行することができる．これは，驚くにはあたらない．というのは，$1/x^2$ は，極座標における遠心力項と同じものであり，したがって，その種の問題は，すでに自由粒子について現われているからだ．経路積分は，プロパゲータの離散化表現のくり返しによって計算することができる．出てくる関数と関数恒等式は，変形ベッセル関数を含むものであり，自由粒子の極座標での経路積分に現われるものと多分に同じものである．

ω が定数の場合には，(30-81) 式のプロパゲータは

$$G(b,t;a,0)=\frac{m\omega\sqrt{ab}}{i\hbar\sin\omega t}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar}(b^2+a^2)\cot\omega t\right\}I_\gamma\left(\frac{m\omega ab}{i\hbar\sin\omega t}\right) \tag{30-82}$$

である．ここで，I_γ は変形ベッセル関数であり，また

$$\gamma=\tfrac{1}{2}\left(1+\frac{8mg}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{30-83}$$

である．$y\to\infty$ の極限では，変形ベッセル関数は

$$I_\gamma(y)=\left(\frac{1}{2\pi y}\right)^{1/2}\exp\left[y-\frac{\frac{1}{2}\left(\gamma^2-\frac{1}{4}\right)}{y}+O\left(\frac{1}{y^2}\right)\right]$$

の漸近的挙動をもつから，$g\to 0$ のとき，G は調和振動子形になる．(30-83) 式から，$g>-\hbar^2/8m$ が要求されるのは明らかである．対応する極座標で必要なのは，中心へ落ちこむことをどうやって避けるかということである．

(30-81)式のラグランジアンは，つぎの3体問題（ただし粒子は1次元運動）のラグランジアン

$$L=\tfrac{1}{2}\left(\dot{x}_1^2+\dot{x}_2^2+\dot{x}_3^2\right)-\tfrac{1}{4}\omega^2\left[(x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^2+(x_1-x_3)^2\right]-g(x_1-x_2)^{-2} \tag{30-84}$$

で適当な変数分離をしても得られる（$-g(x_2-x_3)^{-2}-g(x_1-x_3)^{-2}$ の項を含めてもよい）．したがって，これは，経路積分による3体問題の解も表わす．

ノート

以上の研究は，

K. C. Khandekar and S. V. Lawande, Path Integral for a Three Body Problem, *J. Phys. A* **5**, 812 (1972)

K. C. Khandekar and S. V. Lawande, Path Integration of a Three Body Problem, *J. Phys. A* **5**, L57 (1972)

K. C. Khandekar and S. V. Lawande, Exact Propagator for a Time-Dependent Harmonic Oscillator with and without a Singular Pertubation, *J. Math. Phys.* **16**, 384 (1975)

M. J. Goovaerts, Path Integral Evaluation of a Nonstationary Calogero Model *J. Math. Phys.* **16**, 720 (1975)

にある．極座標での経路積分は，

S. F. Edwards and Y. V. Gulyaev, Path Integrals in Polar Coordinates, *Proc. Roy. Soc.* ***A*279**, 229 (1964)

D. Peak and A. Inomata, Summation over Feynman Histories in Polar Coordinates, *J. Math. Phys.* **10**, 1422 (1969)

が行なった．(30-84)式の3体問題を考えたのは，

F. Calogero, Solution of a Three-Body Problem in One Dimension, *J. Math. Phys.* **10**, 2191 (1969)

である．

30.8　超流動

これは，経路積分の初期の応用例であって，その説明が

R. P. Feynman, Atomic Theory of the λ Transition in Helium, *Phys. Rev.* **91**, 1291 (1953)

R. P. Feynman, *Statisitical Mechanics : A Set of Lectures*, Benjamin, New York, 1972, Chapter 11

に見られる．

30.9　フェルミオン

ボソン場の汎関数積分はやさしいが，フェルミオンについてはそういえない．初期の文献も含んだ最近の論文としては，

D. E. Soper, Construction of the Functional-Integral Representation for Fermion Green's Functions, *Phys. Rev.* **D 18**, 4590 (1978)

がある．これとは違うアプローチでこの問題に迫った研究として，

J. R. Klauder, The Action Option and a Feynman Quantization of Spinor Fields in Terms of Ordinary C-Numbers, *Ann. Phys.* **11**, 123 (1960)

がある．

30.10　経路積分に関する本および総説

以下の文献は，本書のいたるところで引用した．読者の便宜上，一般的な参考文献として，ここに集めておく．まず

J. Schwinger, Ed., *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, Dover, New York, 1958

Feynmanの経路積分の原著論文は，これに再録されている．以下，単行本として

Mark Kac, *Probability and Related Topics in Physical Sciences*, Intersciences, New York, 1959

W. T. Martin and I. Segal, Ed., *Analysis in Function Space*, MIT Press, Cambridge Mass., 1964 (conference proceedings)

R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965

A. Katz, *Classical Mechanics, Quantum Mechanics, Field Theory*, Academic Press, New York, 1965

A. M. Arthurs, Ed., *Functional Integration and Its Applications*, Clarendon Press, Oxford, 1975 (conference proceedings)

G. Rosen, *Formulations of Classical and Quantum Dynamical Theory*, Academic Press, New York, 1969

S. A. Albeverio and R. J. Hoegh-Krohn, *Mathematical Theory of Feynman Path Integrals*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 523, Springer-Verlag, Berlin, 1976

G. J. Papadopoulis and J. T. Devreese, Eds., *Path Integrals and their Applications in Quantum, Statisitical and Solid State Physics* (Proc. NATO Adv. Study Ins., Antwerp 1977), Plenum, New York, 1978

S. Albeverio, P. Combe, R. Hoegh-Krohn, G. Rideau, M. Sirugue-Collin, M. Sinugue, and R. Stora, eds. *Feynman Path Integrals*, Proc. Int. Colloq., New

York, 1979

B. Simon, *Functional Integration and Quantum Physics*, Academic Press, New York, 1979

D. J. Amit, *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena*, McGraw-Hill, New York, 1978

総合報告（総説）として，

E. W. Montroll, Markoff Chains, Wiener Integrals and Quantum Theory, *Commun. Pure and Appl. Math.* **5**, 415 (1952)

I. M. Gel'fand and A. M. Yaglom, Integration in Function Space and its Application in Quantum Physics, *J. Math. Phys.* **1**, 48 (1960)

S. G. Brush, Functional Integrals and Statistical Physics, *Rev. Mod. Phys.* **33**, 79 (1961)

L. Streit, An Introduction to Theories of Integration over Function Spaces, *Acta Phys. Austriaca* (*Suppl.*) **2** (1965)

C. DeWitt-Morette, L'integrale fontionnelle de Feynman : Une Introduction *Ann. Inst. Henri Poincare, Sec. A, Physique Theorique*, **11**, 153 (1969)

E. S. Abers and B. W. Lee, Gauge Theories, *Phys. Rep.* (*Phys. Lett. C*) **9**, 1 (1973)

F. W. Wiegel, Path Integral Methods in Statistical Mechanics, *Phys. Rep.* (*Phys. Lett. C*)**16**, 57 (1975)

J. B. Keller and D. W. McLaughlin, The Feynman Integral, *Am. Math. Monthly* **82**, 451 (1975)

C. DeWitt-Morette, A. Maheshwari, and B. Nelson, Path Integration in Non-Relativistic Quantum Mechanics, *Phys. Rep.* (*Phys. Lett. C*) **50**, No.5, 255 (1979)

M.S.Marinov, Path Integrals in Quantum Theory : An Outlook of Basic Concepts, *Phys. Rep.* (*Phys. Lett. C*) **60**, 1 (1980)

半古典論とWKBについての一般的な総説としては，

M. V. Berry and K. E. Mount, Semiclassical Approximations in Wave Mechanics, *Rep. Prog. Phys.* **35**, 315 (1972)

A. Voros, Semi-Classical Approximations, *Ann. Inst. Henri Poincare, Sec. A*, **24**, 31 (1976)

がある．

訳者あとがき

1981年のいつだったか．カリフォルニア工科大学の書籍部で，原著，L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration,* John Wiley & Sons (1981)　を見つけたときには，小躍りして喜んだものである．それを翻訳する役回りがあとで飛び込んでこようとは，もちろん想像だにしなかった．学部学生時代に，Feynman-Hibbs の *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill,1965) を読んで経路積分を勉強してはみたものの，実は，彼らの“教科書”は非常にむずかしい．最近，畏敬する北原和夫さんによって翻訳されたことは[訳者追加文献1)]，日本の学生のために慶賀すべきことにはちがいない．しかし，内容がむずかしいことに変わりはない．Feynman-Hibbs がむずかしいのは、経路積分の提案者たるFeynmanが，歴史的必然とはいうものの，経路積分の量子論における位置づけや意義の説明に重きをおいていることに，大きな理由がある．理論がどのように応用され，どのように洗練され，どう将来が展望されるかとなると，本書の出現まですぐれた解説はなかったと思う．もちろん，本書はただの解説ではなく，著者の創見にあふれている．Schulman の原著の出現を喜び，楽しみ，一生懸命勉強した人は，私一人とは思えない．

本書がたった一人の人間によって書かれたという事実に圧倒されない人は，少ないのではないかと思う．この本は，教科書というよりは“エッセイ”あるいは専門家のための総説という色彩が濃く，やさしいものでもない．しかし反面，ダイヤモンドの原石のように，若い読者の力を借りて光を放つ日を待っている個所が随所に見られる．理論物理学，数理物理学，理論化学を専攻する若い人々には，必読の書というだけではなく，広く自然科学の理論研究，実験研究を目指す若い人々にも，是非とも雰囲気やものの考え方だけでも楽しんでいただきたいと思う．

原著は1981年に出版されて以来，改訂を経ず（誤植の修正は印刷のたびになされている），今日まで販売され世界中で読まれ続けている．本訳書によって，日本でも長い間読み継がれることになれば，原著者ともども幸いである．経路積分に関連した論文には，必ずといってよいほど引用される基本的文献になっている．Schulman さんには，今のところ，改訂のご意思はないとのことであるが，1981年以来大きく発展した分野もある．たとえば最近，ベリー (Berry) の位相[訳者追加文献10]と総称される，波動関数に付随する幾何学的位相因子の重要性が指摘され（あるいは再発見され），ここ数年多くの論文が出版された．本書23章を見れば，それがベリーの位相の深い原典になっていることがただちに理解されるはずである．これは一例にすぎず，これ以外にも強調したいことが少なくないが，それは訳者の任ではない．かわりに，いくつか新しい教科書，総説などをあとであげておきたい．

本訳書は，適切な価格で翻訳版を提供したいという配慮から，原著の28章 "*Systems with Random Impurities*" および30章 "*Renormalization and Scaling for Critical Phenomena*" を割愛してあり，順送りに章番号が詰めてある．この2章を選択したのは，もちろんSchulmanさんご自身であるが，断腸の思いは私にも共通している．ただ，翻訳されることによって，原著よりはるかに安価で購入できる出版市場のメカニズムにあらためて驚きを感ずるとともに，拙訳の意義もその程度にはあったのかとも思う．

以下，少し技術的なことに触れておきたい．

（1）術語の選択は，"物理学辞典"（改訂版），培風館（1992）および "岩波数学辞典"（第3版），岩波書店（1985）によった．訳者が愛用しているという理由だけで，特に他意はない．逆に，対応する英語を知りたい場合や，内容を補足したいときに利用されるとよいと思う．

（2）人名については，若干の例外を除いてつぎの方針をとった．個人名を指すときには英語（原書のとおり）で表記し，他の術語と合成されて1つの単語を構成しているときはカタカナにした．たとえば，"Feynmanが経路積分をはじめて導いた"，"ファインマン経路積分が定式化された"，というように．また，ロシア系の人名の表記には，英語にも混乱がみられる．本書で

重要なカッツには，原著どおりKạc（Kazも一般的には使われているが）を用いた．

（3）日本語の“位相空間”ということばは，物理では“phase space”の意味で，数学では“topological space”の意味で使われる．数学ではphase spaceを“相空間”といっている．本書では混乱のないかぎり物理流に従った．

本書を読んで下さって容易に想像されたように，これを一人で訳すのは，無謀な行為である．あるいは，してはいけなかったことなのかもしれない．適切でない訳や用語遣い，誤植なども少なくないことをおそれる．読者のご叱正をひたすらお願いするしだいである．また，Feynmanの向こうを張るような，生き生きとしたシュルマン英語の息遣いや，ユーモアをお伝えできなかったことを残念に思う．私の力量と許された時間では，訳に凝るのは無理なことだった．

最後に，お礼の言葉を申し上げたい．誰よりも，もちろんSchulmanさんご自身にお礼申し上げたい．日本語版への序文，写真などもお寄せいただいた．なによりもこのすばらしい原著に感謝したい．講談社サイエンティフィクの明　恒次郎さんには，ずいぶんご迷惑をおかけした．そもそも，訳者が研究，教育，校務に多忙のため，お話しをいただいてから翻訳は遅々としてはかどらなかった．明さんの情熱と激励なしには，仕事は完了しなかったにちがいない．

1995年3月

高塚　和夫

訳者による追加文献

以下に，原著出版以後の発展（のほんの一部）の簡単な紹介をも兼ねて，新たな文献と簡単な説明を訳者の責任で載せておきたい．

Feynman-Hibbs の訳書は，

1）R.P. ファインマン，A.R. ヒッブス，ファインマン経路積分と量子力学（北原　和夫訳），マグロウヒル（1990）

である．その他，経路積分の教科書として，

2）崎田　文二，吉川　圭二，経路積分による多自由度の量子力学，岩波書店（1986）

3）大貫　義朗，鈴木　増雄，柏　太郎，経路積分の方法，岩波書店（1992）

がある．2）と3）は，本書とは異なる面をていねいにカバーしている．特に，2）には，フェルミ粒子の経路積分が解説されている．

少し古いが，総説として，

4）C. DeWitt-Morette, A. Maheshwari, and B. Nelson, *Phys. Rep.* **50**, 255 (1979).

がある．この総説は，曲がった空間の経路積分など，数理物理的に面白い話題を扱っている．

このほか，

5）M.S. Marinov, *Phys. Rep.* **60**, 1 (1980).

がある．

17章までの中心的話題は WKB あるいは半古典理論であるが，シュレーディンガー方程式とラグランジュ多様体の立場から構築された理論として，

6）V.P. Maslov and M. V. Fedoriuk, *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*, Reidel (1981)

が非常に有名である．

18章のエネルギーグリーン関数は，Gutzwiller によって発展させられ，状態密度（エネルギーグリーン関数のトレース）の計算に応用されて，いわゆる量子カオスの道が開かれた．18章のノートのほかに，たとえば，

7）M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, *Chaos and Quantum Physics*, North-Holland（1991）

8) L.E. Reichl, *The Transition to Chaos*, Springer-Verlag (1992)
を見よ．カオス一般については，

9) A.J. Lichtenberg and M.A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, Springer-Verlag (1992)
がよい．

本書23章でホモトピー論の話題が出てくる．これは，上に述べたように，ベリー位相の源流といえる．ベリー位相は最近の熱い話題になっている．つぎの論文

10) M.V. Berry, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **A392**, 45 (1984)
と論文選集

11) A. Shapere and F. Wilczek, *Geometrical Phases in Physics*, World Scientific (1989)
および，日本語解説

12) 倉辻比呂志，日本物理学会誌，**47**，447 (1992)
を参考にしていただきたい．

21章や26章に関連して，統計力学や多体問題については，すぐれた教科書が多く，列挙しきれない．

13) H. ハーケン，協同現象の数理（牧島　邦夫，小森　尚志訳），東海大学出版会 (1980)
は，いわゆるシナジェティクスや非線形物理学の入門的教科書であるが，確率過程と経路積分についても，よい入門的記述がある．より高度なものとして，たとえば

14) G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley (1988)
15) J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley (1988)
が推奨される．

27章のコヒーレント状態の研究も量子光学や衝突論に関連して盛んである．

16) W.H. Louisell, *Quantim Statistical Properties of Radiation*, John Wiley & Sons, (1973)
17) J.R. Klauder and B.-S. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific (1985)
また，24) も見られたい．

28章のインスタントンとトンネル現象について．インスタントンについて

も，本書はよく引用される．その，多次元への具体的実現という点で，

18） A. Auerbach and S. Kivelson, *Nucl. Phys.* **B257**, [FS14] 799 (1985).

を追加しておく．ニュートン方程式の解としての古典経路も，インスタントン経路も，ハミルトン - ヤコビ方程式の，より大きなクラスの解の特別な場合にすぎないことが最近，明らかにされた．

19） K. Takatsuka and H. Ushiyama, *Phys. Rev.* **A51**, 4353 (1995).

トンネル理論の最近の発展は，

20） S. Takada and H. Nakamura, *J. Chem. Phys.* **100**, 98 (1994)

を参考にされるとよい．

29章の位相空間経路積分について．Wignerが，量子力学に位相空間をもちこんだことはよく知られている．

21） E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932)

最近までの発展は，

22） Go. Torres-Vega and J. Frederick, *J. Chem. Phys.* **98**, 3103 (1993)

の引用文献によってさかのぼっていくことができる．最近の位相空間経路積分は，本書の文脈（Davies や Garrodのとり扱い）とは別に，Wigner 的な位相空間量子力学の関連で議論されることも多い．たとえば，

23） K. Takatsuka, *Phys. Rev.* **A39**, 5961 (1989)

24） J.R. Klauder, *Ann. Phys.* **180**, 108 (1987)

25） S. Adachi, *Ann. Phys.* **195**, 45 (1989)

化学反応等の半古典理論については

26） W.H. Miller, *Adv. Chem. Phys.* **25**, 69 (1974); *Adv. Chem.Phys.* **30**, 77 (1975)

27） M.S. Child, *Semiclassical Mechanics with Molecular Applications*, Oxford University Press (1991)

が代表的である．

場の理論については

28） P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer*, Addison-Wesley (1989)

を追加しておく．

人 名 索 引

E

F

G

H

I

J

K

事 項 索 引

訳者紹介

高塚　和夫（工学博士）

1973年　大阪大学基礎工学部卒業
現　在　名古屋大学大学院人間情報学研究科　教授

NDC421　348p　21cm

ファインマン経路積分

1995年5月10日　第1刷発行
1995年9月10日　第2刷発行

訳　者　高塚和夫
発行者　野間佐和子
発行所　株式会社　講談社
〒112-01　東京都文京区音羽2-12-21
販売部　(03) 5395-3624
製作部　(03) 5395-3615
編　集　株式会社　講談社サイエンティフィク
代表　中島信也
〒162　東京都新宿区新小川町9-25　日商ビル
編集部　(03) 3235-3701
印刷所　株式会社平河工業社・半七写真印刷工業株式会社
製本所　株式会社国宝社

ISBN4－06－153217－0 (KS)